

# **Strominduziertes Schalten der Magnetisierung**

## DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades

Dr. rer. nat.  
im Fach Physik

eingereicht an der  
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I  
Humboldt-Universität zu Berlin

von  
**Dipl.-Phys. Niko Sandschneider**  
geboren am 20.10.1979 in St. Ingbert

Präsident der Humboldt-Universität zu Berlin:  
Prof. Dr. Dr. h.c. Christoph Marksches

Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I:  
Prof. Dr. Lutz-Helmut Schön

Gutachter:

1. Prof. Dr. Wolfgang Nolting
2. PD Dr. Bernd Esser
3. Prof. Dr. Michael Potthoff

**eingereicht am:** 31. Juli 2009

**Tag der mündlichen Prüfung:** 5. November 2009

## Abstract

This thesis is concerned with the microscopic modelling of current-induced switching of magnetization in magnetic tunnel junctions. The tunnel junction consists of two ferromagnets which are divided by a nonmagnetic insulator and a paramagnet, which acts as an electron reservoir. The ferromagnets are both described by the Hubbard model. By applying a voltage the chemical potentials on both sides of the insulator are shifted which results in a finite tunneling current. Within the model the current is simulated by a hybridization between neighbouring regions. The model has to be solved in non-equilibrium since thermal equilibrium requires a constant chemical potential for the whole system, which is not the case due to the voltage. Thus the Keldysh formalism will be used for evaluating the model.

Since the Hubbard model is not exactly solvable one needs approximations. In this work a non-equilibrium spectral density approach is developed. It is based on a high-energy expansion of the retarded Green's function and takes interactions beyond the mean field level into account.

The numerical results of the theory are in qualitative agreement with experiments. It will be shown that it is possible to correctly get the hysteresis behaviour of the magnetization of the free ferromagnet in dependence on the applied voltage. Thus the relative alignment of the two magnetizations can be switched just by applying an electric field. This can be explained with the corresponding quasiparticle densities of state. Furthermore the behaviour of the critical voltage will be discussed systematically by calculating phase diagrams of the tunnel junction.

## **Zusammenfassung**

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der mikroskopischen Modellierung von strominduziertem Schalten der Magnetisierung in magnetischen Tunnelstrukturen. Die Tunnelstruktur besteht aus zwei durch einen nichtmagnetischen Isolator voneinander getrennten Ferromagneten und einem Paramagneten, der als Elektronenreservoir dient. Die Ferromagnete werden beide durch das Hubbard-Modell beschrieben. Durch Anlegen einer Spannung verschieben sich die chemischen Potentiale auf beiden Seiten des Isolators, wodurch ein endlicher Tunnelstrom entsteht. Dieser wird im Rahmen des Modells durch eine Hybridisierung zwischen benachbarten Schichten simuliert. Das Modell muss im Nichtgleichgewicht gelöst werden, da aufgrund der unterschiedlichen chemischen Potentiale thermodynamisches Gleichgewicht nicht angenommen werden darf. Daher wird zur analytischen Auswertung der Keldysh-Formalismus verwendet, der eine Erweiterung der Viel-Teilchen-Theorie ins Nichtgleichgewicht darstellt.

Da es sich beim Hubbard-Modell um ein nicht exakt lösbares Viel-Teilchen-Modell handelt, wurde in der Arbeit eine approximative Lösung, der sogenannte Nichtgleichgewichtsspektraldichteansatz, entwickelt. Dieser beruht auf einer Hochenergieentwicklung der retardierten Greenfunktion mit Hilfe der exakt berechenbaren Spektralmomente.

Die numerischen Resultate stimmen qualitativ mit dem Experiment überein. Insbesondere gelingt es, das Hystereseverhalten der Magnetisierung des freien Ferromagneten in Abhängigkeit der angelegten Spannung korrekt zu reproduzieren. Es kann somit allein durch Anlegen einer Spannung kontrolliert zwischen paralleler und antiparalleler Ausrichtung der Magnetisierungen geschaltet werden. Dieses Phänomen ist anhand der entsprechenden Quasiteilchenzustandsdichten erklärbar. Weiterhin wird das Verhalten der kritischen Spannung systematisch in Form von Phasendiagrammen dargestellt und diskutiert.



# Inhaltsverzeichnis

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>  | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Der Keldysh-Formalismus</b>   | <b>7</b>  |
| 2.1      | Definition . . . . .   | 8         |
| 2.2      | Analytische Fortsetzungsregeln . . . . .                                     | 15        |
| 2.3      | Die Keldysh-Gleichung . . . . .  | 18        |
| 2.4      | Unterschiede zum Gleichgewichtsformalismus . . . . .                         | 21        |
| <b>3</b> | <b>Modellbeschreibung</b>  | <b>25</b> |
| 3.1      | Hubbard-Modell . . . . .   | 26        |
| 3.2      | Modell-Hamilton-Operator . . . . .   | 27        |
| 3.3      | Selbstkonsistente Berechnung der Magnetisierung . . . . .                    | 30        |
| 3.3.1    | Berechnung der NEGF des rechten Ferromagneten . . . . .                      | 31        |
| 3.3.2    | Berechnung der kleineren Greenfunktionen des rechten Ferromagneten . . . . . | 36        |
| 3.4      | Berechnung des Tunnelstroms . . . . .  | 38        |
| 3.5      | Alternative Tunnelkopplungen . . . . .                                       | 42        |
| 3.5.1    | Vollständige Wellenzahlerhaltung . . . . .                                   | 43        |
| 3.5.2    | Erhaltung der Parallelkomponente der Wellenzahl . . . . .                    | 46        |
| 3.5.3    | Exakte Lösung ohne Wellenzahlerhaltung . . . . .                             | 47        |
| 3.6      | Einfaches Hybridisierungsmodell . . . . .                                    | 52        |
| <b>4</b> | <b>Nichtgleichgewichtsspektraldichteansatz</b>                               | <b>55</b> |
| 4.1      | Hochenergieentwicklung . . . . .   | 56        |
| 4.2      | Berechnung der ersten vier Momente des rechten Ferromagneten . . . . .       | 59        |
| 4.3      | Berechnung der Bandkorrekturen . . . . .                                     | 62        |
| 4.4      | Hochenergieentwicklung der Tunnelselbstenergie . . . . .                     | 69        |
| 4.5      | Bestimmung der Wechselwirkungsselbstenergie . . . . .                        | 71        |
| 4.6      | Gleichgewichtsgrenzfall . . . . .  | 72        |
| <b>5</b> | <b>Numerische Resultate</b>  | <b>75</b> |
| 5.1      | Einfaches Hybridisierungsmodell . . . . .                                    | 75        |
| 5.2      | SDA im Gleichgewicht . . . . .   | 78        |
| 5.3      | Modellparameter . . . . .  | 83        |
| 5.4      | Strominduziertes Schalten der Magnetisierung . . . . .                       | 85        |
| 5.5      | Stromberechnung . . . . .  | 90        |
| 5.6      | Einfluss der Modellparameter auf das Magnetisierungsverhalten . . . . .      | 96        |

|          |   |            |
|----------|---|------------|
| 5.6.1    | Besetzungszahl $n$ . . . . .  | 98         |
| 5.6.2    | Linke Coulomb-Wechselwirkungsstärke $U_L$ . . . . .   | 102        |
| 5.6.3    | Rechte Coulomb-Wechselwirkungsstärke $U_R$ . . . . .  | 104        |
| 5.6.4    | Hybridisierungsstärke $\epsilon_{MI}$ zwischen dem Isolator und den Ferromagneten . . . . . | 107        |
| 5.6.5    | Hybridisierungsstärke $\epsilon_{RP}$ zwischen Paramagnet und rechtem Ferromagnet . . . . . | 110        |
| 5.6.6    | Isolatorbandschwerpunkt $T_{0,I}$ . . . . .   | 115        |
| 5.6.7    | Bandbreite $W_L$ des linken Ferromagneten . . . . .   | 117        |
| 5.6.8    | Isolatorbandbreite $W_I$ . . . . .  | 119        |
| 5.6.9    | Bandbreite $W_R$ des rechten Ferromagneten . . . . .  | 120        |
| 5.6.10   | Bandbreite $W_P$ des Paramagneten . . . . .   | 123        |
| 5.6.11   | Temperatur $T$ . . . . .  | 125        |
| 5.7      | Wahl des rechten Bandschwerpunkts . . . . .   | 127        |
| 5.8      | Mean Field-Näherung für beide Ferromagnete . . . . .  | 133        |
| 5.9      | Spektraldichteansatz für beide Ferromagnete . . . . .                                       | 136        |
| 5.10     | Nichterhaltung der Wellenzahl beim Zurücktunneln . . . . .                                  | 140        |
| <b>6</b> | <b>Zusammenfassung und Ausblick</b>   | <b>143</b> |
|          | <b>(Anti-)Kommutatorrelationen</b>  | <b>147</b> |
| .1       | Allgemeine Kommutatoren und Antikommutatoren für Fermionen . . . .                          | 147        |
| .2       | Kommutatoren mit dem Hamilton-Operator (3.2) . . . . .                                      | 148        |
| .2.1     | Ortsdarstellung . . . . .   | 148        |
| .2.2     | Wellenzahldarstellung . . . . .   | 149        |
| .3       | Antikommutatoren mit dem Hamilton-Operator (3.2) . . . . .                                  | 149        |
| .4       | Berechnung des Antikommutators aus Gleichung (4.28) . . . . .                               | 149        |
|          | <b>Einige analytische Details</b>   | <b>151</b> |
| .5       | Spektraldarstellung . . . . .   | 151        |
| .6       | Fouriertransformation der Bandkorrektur (4.33) . . . . .                                    | 152        |
| .7       | Tunnelbandkorrektur . . . . .   | 153        |
| .8       | Exakte Lösung ohne Wellenzahlerhaltung . . . . .  | 155        |

# 1 Einleitung

Durch die Verleihung des Nobelpreises für Physik im Jahr 2007 an Peter Grünberg und Albert Fert haben spinabhängige Transportphänomene, insbesondere der Riesenmagnetowiderstandseffekt [1, 2], eine große Aufmerksamkeit erfahren. Dies lag einerseits natürlich an der immensen Bedeutung, die diesem Effekt mittlerweile bei der Informationsspeicherung in Festplatten zukommt [3]. Andererseits dürfte das Interesse der breiten Öffentlichkeit auch damit zusammenhängen, dass nach über 20 Jahren der Nobelpreis wieder an einen deutschen Physiker, der auch tatsächlich in Deutschland arbeitet, verliehen wurde. Die Entdeckung des Riesenmagnetowiderstandseffekts wird im Allgemeinen als die Geburtsstunde der sogenannten Spintronik angesehen [4]. Dieses Teilgebiet der Festkörperphysik hat es sich zum Ziel gesetzt, neben der elektrischen Ladung auch den Spinfreiheitsgrad für elektronische Anwendungen nutzbar zu machen [5]. Dadurch erhofft man sich eine ganze Reihe von Vorteilen gegenüber der heutigen Elektronik, wie z.B. nichtflüchtige Speicher, schnellere Verarbeitungszeiten, geringerer Energieverbrauch und höhere Speicherdichten, um nur einige zu nennen [6, 7, 8].

Der Riesenmagnetowiderstandseffekt tritt in magnetischen Schichtsystemen auf. In diesen sind zwei ferromagnetische Materialien (Co,Fe,...) durch eine nichtmagnetische, metallische Zwischenschicht (Cu,Cr,...) voneinander getrennt. Durch Anlegen einer Spannung kommt es zum Stromfluss durch diese Struktur. Dabei hängt die Größe des Stroms von der relativen Orientierung der Magnetisierungen der beiden Ferromagnete ab. Sind sie parallel ausgerichtet, misst man einen hohen, im antiparallelen Fall dagegen einen niedrigen Strom. Man kann also schließen, dass die Struktur in paralleler Orientierung einen geringeren Widerstand als in antiparalleler Ausrichtung besitzt. Die Größe, die diese Widerstandsdifferenz am besten zum Ausdruck bringt, ist das sogenannte GMR-Verhältnis

$$GMR = \frac{\Delta R}{R} = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P}, \quad (1.1)$$

wobei  $R_P$  ( $R_{AP}$ ) den Widerstand in paralleler (antiparalleler) Orientierung bezeichnet. In den ursprünglichen Arbeiten von Fert *et al.* [2] wurde ein GMR-Verhältnis von rund 80 % gemessen. Da diese Widerstandsänderung deutlich größer war, als alle vorher bekannten Magnetowiderstandseffekte, wurde er folglich Riesenmagnetowiderstandseffekt genannt. Mittlerweile wurden GMR-Verhältnisse von mehreren 100 % gemessen [9]. Damit kann durch eine Widerstandsmessung, die technisch typischerweise relativ einfach durchzuführen ist, deutlich zwischen den beiden Zuständen unterschieden werden. Darauf beruht das Funktionsprinzip moderner Festplatten, bei denen die beiden Ausrichtungen als Bitzustände '0' bzw. '1' interpretiert werden.

Offenbar hat die relative Orientierung der Magnetisierungen also einen Einfluss auf die Transporteigenschaften eines magnetischen Schichtsystems. Ist auch die umgekehrte

## 1 Einleitung

Wirkung denkbar, d.h. kann ein Strom durch das System die Magnetisierungsrichtung beeinflussen? Genau diese Frage haben sich 1996 unabhängig voneinander John Slonczewski und Luc Berger gestellt [10, 11]. Die Grundidee ihrer Argumentation ist relativ einfach zu verstehen. Die Spinrichtung von itineranten Elektronen, die sich durch einen Ferromagneten bewegen, wird im Wesentlichen parallel zu seiner Magnetisierungsachse ausgerichtet sein. Anschließend werden sie durch Anlegen einer Spannung über eine nichtmagnetische Zwischenschicht, die keinen Einfluss auf ihre Spinrichtung nehmen wird, in einen zweiten Ferromagneten transportiert. Damit wird (Spin-)Drehimpuls zwischen den ferromagnetischen Schichten transferiert. Dieser übt ein Drehmoment auf die Magnetisierung des zweiten Ferromagneten aus, das Spintransferelement (engl. spin-transfer torque) genannt wird. Wenn die Stromdichten sehr hoch sind (typischerweise größer als  $10^7$  A/cm<sup>2</sup> [12]), kann dieses Drehmoment ausreichen, um die Magnetisierung zu destabilisieren. Wie sie sich daraufhin verhält, hängt davon ab, ob ein weiterer stabiler Gleichgewichtszustand existiert. Liegt in dem System eine uniaxiale Anisotropie vor, werden beispielsweise im Normalfall mindestens zwei stabile Zustände vorhanden sein [13]. Einer davon entspricht paralleler, der andere antiparalleler Ausrichtung bezüglich der Anisotropieachse. In diesem Fall wird sich die Magnetisierung durch das Drehmoment in den jeweils anderen Zustand begeben. Dieser Prozess wird strominduziertes Schalten der Magnetisierung genannt und stellt das zentrale Thema der vorliegenden Arbeit dar. Mit Hilfe dieses Effekts ist es möglich, allein durch Anlegen eines elektrischen Feldes zwischen den beiden Orientierungen der Magnetisierungen, d.h. zwischen '0' und '1', zu schalten. In heutigen Speicherelementen wird dieses Umschalten hingegen mit Hilfe eines äußeren Magnetfelds bewerkstelligt. Durch die fortschreitende Miniaturisierung wird es allerdings immer schwieriger das Magnetfeld auf den benötigten Längenskalen zuverlässig zu kontrollieren [13]. Diese Probleme treten bei elektrischen Feldern nicht auf. Daher wäre die Verwendung des strominduzierten Schaltens zur Informationsspeicherung ein großer technischer Fortschritt.

Falls hingegen keine weitere stabile Magnetisierungsrichtung vorliegt, wird die Magnetisierung um ihre instabile Gleichgewichtsposition präzedieren. Der Präzessionswinkel hängt dabei vom Drehmoment ab, das wiederum durch den Strom beeinflusst werden kann. Bedingt durch den GMR-Effekt führt die oszillierende Magnetisierung zu Spannungsschwankungen, die im Mikrowellenbereich liegen [14]. Daher könnte dieser Effekt zu einem magnetischen Analogon des Lasers führen, bei dem die Magnetisierungsänderung Mikrowellenstrahlung induziert. Berger schlägt hierfür die Bezeichnung SWASER (spin-wave amplification by stimulated emission of radiation) vor [11, 13]. Dieser Fall soll in der vorliegenden Arbeit jedoch nicht untersucht werden.

Zur Überprüfung seiner Theorie des strominduzierten Schaltens schlug Slonczewski eine explizite Geometrie des Schichtsystems vor. Diese sollte aus einer dicken („fixierten“) und einer dünnen („freien“) magnetischen Schicht bestehen, die durch ein nichtmagnetisches Metall getrennt sind. Die unterschiedlichen Volumina der ferromagnetischen Schichten führen dazu, dass der dünnere Ferromagnet leichter umzuorientieren ist als der dickere. Alternativ dazu könnte man auch Materialien mit unterschiedlich hohen Koerzitivfeldern wählen [13]. Einige Jahre nach dieser Vorhersage konnte das Umschalten der Magnetisierung in Co/Cu/Co-Systemen experimentell von mehreren Gruppen bestätigt werden



[15, 16, 17, 18]. Auch die Größenordnung der kritischen Stromdichte, die zum Schalten benötigt wird, stimmt mit den theoretischen Vorhersagen überein. Dabei spielte der Riesenmagnetowiderstand die entscheidende Rolle, da nur mit seiner Hilfe anhand von Widerstandsmessungen klar zwischen den Zuständen mit paralleler bzw. antiparalleler Orientierung unterschieden werden konnte.

Einige Jahre später ist es gelungen, strominduziertes Schalten auch in magnetischen Tunnelstrukturen (MTJ, engl. magnetic tunnel junction), bei denen die beiden Ferromagnete durch einen nichtmagnetischen Isolator getrennt sind, zu beobachten [19, 20, 21]. Dazu waren zunächst große technische Fortschritte bei der Herstellung von ultradünnen Tunnelbarrieren nötig, um die zum Schalten nötigen hohen Stromdichten zu erreichen, ohne die Tunnelstruktur zu zerstören [22]. Neuere MTJs zeichnen sich durch einen hohen Tunnelmagnetowiderstand (TMR) von mehreren 100 % aus [23, 24, 25, 26]. Dabei handelt es sich sozusagen um das Gegenstück zum GMR bei metallischen Trennschichten. Daher wird allgemein davon ausgegangen, dass die neue Generation magnetischer Speichermedien aus MTJs bestehen wird [27, 28]. Die vorliegende Arbeit wird sich deshalb auf die Modellierung von strominduziertem Schalten in MTJs beschränken.

Die ursprünglichen Theorien von Slonczewski und Berger sind quantenmechanischer Art. Beide Autoren lösen die Schrödinger-Gleichung des Schichtsystems. Dies ist natürlich nur im Rahmen eines Ein-Teilchen-Bildes möglich. Daher kann der Ferromagnetismus nur auf sehr einfache Art modelliert werden, indem man in den Ferromagneten jeweils ein spinabhängiges Potential  $V_{\pm}$  einführt. Damit wird eine der Spinrichtungen energetisch bevorzugt. Dies entspricht einer Näherung auf Hartree-Fock- bzw. Mean Field-Niveau. Mit dieser Annahme lässt sich die zeitliche Änderung des Spindrehimpulses, also das Spindrehmoment,  $\dot{\mathbf{S}}$  in der freien Schicht berechnen, womit seine Dynamik bekannt ist [29, 30]. Slonczewski konnte zeigen, dass dieses Drehmoment einem zusätzlichen Term in der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung (LLG) entspricht. Diese lautet (ohne Zusatzterm) [13]

$$\frac{\mu_0}{\gamma} \frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\mathbf{M} \times \mathbf{B}_{eff} - \frac{\alpha}{M_S} \mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{B}_{eff}), \quad (1.2)$$

wobei  $\mu_0$  die Permeabilität des Vakuums,  $\gamma$  das gyromagnetische Verhältnis,  $\alpha$  der phänomenologische Gilbert-Dämpfungsfaktor und  $M_S$  die Sättigungsmagnetisierung ist<sup>1</sup>. Die Gleichung beschreibt die Bewegung des Magnetisierungsvektors  $\mathbf{M}$  in einem effektiven Magnetfeld  $\mathbf{B}_{eff}$ . Ihre Herleitung findet man beispielsweise in Ref. [31]. Der erste Term beschreibt die Präzession der Magnetisierung um die Richtung des effektiven Felds. Der zweite Term führt zu einer Dämpfung dieser Präzessionsbewegung, wodurch sich der Magnetisierungsvektor spiralförmig in Richtung von  $\mathbf{B}_{eff}$  orientiert, d.h. der Präzessionswinkel wird im Laufe der Zeit gegen Null gehen. Wie schnell dies geschieht wird im Wesentlichen vom Dämpfungsfaktor  $\alpha$  bestimmt. Wird der zusätzliche Term aufgrund des Spintransferdrehmoments berücksichtigt, wird aus der LLG-Gleichung die Landau-

---

<sup>1</sup>In der Literatur existieren verschiedene Konventionen zur Definition des Koeffizienten  $\alpha$ . Hier wird diejenige aus Ref. [13] verwendet.

## 1 Einleitung

Lifshitz-Gilbert-Slonczewski-Gleichung (LLGS) [32, 33]:

$$\frac{\mu_0}{\gamma} \frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\mathbf{M} \times \mathbf{B}_{eff} - \frac{\alpha}{M_S} \mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{B}_{eff}) + \frac{g}{e\gamma M_S} \frac{I}{A} \mathbf{M} \times (\hat{\mathbf{M}} \times \hat{\mathbf{M}}_{fix}) \quad (1.3)$$

Dabei bezeichnet  $I/A$  die Stromdichte,  $e$  die Elektronenladung und die Dächer über den Magnetisierungen sollen andeuten, dass es sich um normierte Größen handelt, d.h.  $\hat{\mathbf{M}} = \mathbf{M}/|\mathbf{M}|$ .  $\mathbf{M}_{fix}$  ist der Magnetisierungsvektor des dicken, fixierten Ferromagneten.  $g$  ist eine dimensionslose, positive, materialspezifische Konstante, die angibt, wie effizient Spindrehmoment vom fixierten auf den freien Ferromagneten übertragen werden kann. Offenbar hat der zusätzliche Term eine ähnliche Struktur wie der Gilbert-Dämpfungsterm. Wie eine genauere Analyse zeigt, kann er, je nach seinem Vorzeichen, die Dämpfung also verstärken oder ihr entgegenwirken [13]. Im letzteren Fall würde sich der Präzessionswinkel vergrößern, wodurch die Magnetisierung destabilisiert wird und sich letztlich oberhalb einer kritischen Stromstärke  $I_c$  auch umorientieren kann. Ohne den zusätzlichen Term würde sie aufgrund der Dämpfung immer in Richtung von  $\mathbf{B}_{eff}$  orientiert bleiben.

Während die LLGS-Gleichung also prinzipiell die Beschreibung von strominduziertem Schalten ermöglicht, ist ihre Verwendung aus mehreren Gründen nicht ganz unproblematisch. Erstens handelt es sich um eine makroskopische, halbklassische Beschreibung, die die Quantennatur des Spins komplett außer Acht lässt. Die Magnetisierung wird als klassischer Vektor behandelt, der beliebige Einstellungen annehmen darf. Da sie sich letztlich aber aus Erwartungswerten von Spins berechnet,  $\mathbf{M} \sim \gamma \sum_i \langle \mathbf{S}_i \rangle$ , ist dies strenggenommen nicht korrekt, weil die Spins  $\mathbf{S}_i$  an einem Gitterplatz quantisiert sind und somit nicht in beliebige Raumrichtungen zeigen können. Zweitens kann der Betrag der Magnetisierung innerhalb dieser Theorie nicht selbstkonsistent bestimmt werden, sondern man muss ihn als zusätzlichen Parameter vorgeben. Dasselbe gilt insbesondere auch für die beiden Parameter  $\alpha$  und  $g$ , die ganz entscheidenden Einfluss auf das Auftreten des Schaltens haben. Gerade die mikroskopischen Ursachen des Dämpfungskoeffizienten  $\alpha$  sind auch über 50 Jahre nach seiner Einführung noch nicht vollständig verstanden [34, 35, 36]. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung scheint zwar eine zentrale Rolle zu spielen, aber der endgültige experimentelle Beweis dafür steht noch aus [37, 38]. Als weitere mögliche Mechanismen wurden unter anderem Wirbelströme, magnetoelastische Kopplung sowie Magnonen- oder Phononenstreuung vorgeschlagen [39, 40, 41, 42, 43, 44, 45]. Drittens und letztens ist es kaum möglich im Rahmen der LLGS-Gleichung die Elektron-Elektron-Wechselwirkung besser als auf Mean Field-Niveau zu behandeln.

Alle bisherigen Theorien zur Modellierung von strominduziertem Schalten können grob in drei Kategorien eingeordnet werden [46]. Die erste Gruppe geht von der klassischen LLGS-Gleichung aus und löst die Bewegungsgleichung der Magnetisierung [47, 48, 49, 50, 51, 52]. Dabei werden neben dem Slonczewski-Term noch andere Erweiterungen betrachtet, die unter anderem den Einfluss von Spinströmen und Spinakkumulation berücksichtigen [53]. Die zweite Gruppe konzentriert sich auf die direkte Berechnung des Spintransferdrehmoments, entweder im Rahmen von phänomenologischen Modellen oder bereits bestehender (quantenmechanischer oder halbklassischer) Transportformalismen

[54, 55, 56, 57, 58]. Zu den letzteren gehören der Kubo-, Boltzmann- und Landauer-Formalismus [59, 60, 61, 62]. Das berechnete Drehmoment kann anschließend zur Lösung der LLGS-Gleichung verwendet werden. Die dritte Gruppe berechnet die Parameter der Transporttheorien ( $\alpha, g, \dots$ ) im Rahmen von mikroskopischen Modellen. Dazu gehören die ursprünglichen Arbeiten von Slonczewski und Berger, einige *ab initio*-Studien [63, 64] und insbesondere die Arbeiten von David Edwards [65, 66, 67]. Allen diesen Theorien ist gemeinsam, dass das Verhalten der Magnetisierung letztlich durch die LLGS-Gleichung festgelegt ist, deren Schwächen bereits diskutiert wurden.

In der vorliegenden Arbeit soll daher versucht werden, einen komplett neuen Weg zur Beschreibung von strominduziertem Schalten zu gehen, nämlich die direkte, mikroskopische Berechnung der Magnetisierung des freien Ferromagneten in Anwesenheit eines Stroms im Rahmen eines Vielteilchenmodells. Der Strom führt dazu, dass sich das Schichtsystem nicht im thermodynamischen Gleichgewicht befindet. Daher kann die „übliche“ Vielteilchentheorie nicht ohne weiteres verwendet werden, da viele ihrer Eigenschaften nur bei Voraussetzung von thermodynamischem Gleichgewicht gelten. Sie muss somit zunächst auf Nichtgleichgewichtssituationen erweitert werden, um die Magnetisierung erfolgreich berechnen zu können. Diese Erweiterung, der sogenannte Keldysh-Formalismus, existiert schon seit längerer Zeit und wird in Kapitel 2 samt seiner wesentlichen Eigenschaften vorgestellt. Der Schwerpunkt der Darstellung wird dabei auf den Unterschieden zum Gleichgewichtsformalismus liegen. Außerdem wird gezeigt, dass auf dem Keldysh-Formalismus beruhende Transporttheorien sich, im Gegensatz zur LLGS-Gleichung, auch auf Wechselwirkungen über Mean Field-Niveau hinaus erweitern lassen.

Das eigentliche Modell wird in Kapitel 3 diskutiert. Es wird ein magnetisches Schichtsystem angenommen, das aus zwei, durch einen nichtmagnetischen Isolator getrennten, Ferromagneten und einem zusätzlichen Paramagneten, der als Elektronenreservoir dient, besteht. Die Ferromagnete werden im Rahmen des Hubbard-Modells beschrieben. Dieses wird zu Beginn des Kapitels kurz vorgestellt. Im größten Teil von Kapitel 3 wird beschrieben, wie es gelingt, die Nichtgleichgewichtsmagnetisierung mit der Hilfe von Greenfunktionen im Keldysh-Formalismus zu berechnen. Nachdem dies gelungen ist, wird als weitere wichtige Größe der Tunnelstrom durch das System abgeleitet. Anschließend wird auf denkbare Alternativen zu dem vorgeschlagenen Modell eingegangen, die sich insbesondere auf die Modellierung des Transports beziehen. Am Ende des Kapitels folgt noch eine kurze Darstellung eines einfachen, wechselwirkungsfreien Zweibandmodells, anhand dessen der Einfluss einer Hybridisierung zwischen den Bändern, die für die Beschreibung des Transports wichtig ist, diskutiert werden kann. Dies wird die Erklärung des Verhaltens des vollen Modells erleichtern.

Ein wesentlicher Bestandteil dieser Arbeit ist die Beschreibung der Wechselwirkung. Wie bereits erwähnt, wird sie in praktisch allen bisherigen theoretischen Arbeiten zum strominduzierten Schalten auf Mean Field-Niveau behandelt. In Kapitel 4 wird der sogenannte Nichtgleichgewichtsspektraldichteansatz (NSDA) abgeleitet. Dabei handelt es sich um eine höhere Näherung der ferromagnetischen Selbstenergie, die auch Prozesse, die über Mean Field hinausgehen, berücksichtigt. Sie wird aus einer Hochenergieentwicklung der Greenfunktion gewonnen. Im Gleichgewicht wird diese Methode als Spek-

## 1 Einleitung

traldichteansatz (SDA) bezeichnet, von dem bereits in anderen Arbeiten gezeigt werden konnte, dass er qualitativ glaubwürdige Aussagen über das Magnetisierungsverhalten des Hubbard-Modells ermöglicht. Es wird explizit gezeigt, dass die NSDA im Grenzfall des thermodynamischen Gleichgewichts die SDA korrekt reproduziert.

In Kapitel 5 wird die Theorie numerisch ausgewertet. Nach einer kurzen Diskussion des einfachen Zweibandmodells und der SDA im Gleichgewicht wird anhand der spannungsabhängigen Magnetisierungskurven bewiesen, dass das Modell in der Tat in der Lage ist, strominduziertes Schalten zu beschreiben. Dabei erweisen sich der Einfluss sowohl der Hybridisierung als auch des Tunnelstroms als entscheidend, weshalb beide in eigenen Abschnitten detailliert diskutiert werden. Anschließend werden die vorhandenen Modellparameter systematisch variiert, um ihren Einfluss auf das Schaltverhalten zu untersuchen. Es wird sich zeigen, dass nur für bestimmte Parametersätze ein Umorientieren der Magnetisierung möglich ist. Allerdings wird im direkten Vergleich mit der Mean Field-Näherung deutlich, dass die zum Schalten nötigen Parameterbereiche in der NSDA deutlich größer sind. Dies kann darauf zurückgeführt werden, dass die magnetische Stabilität in Mean Field überschätzt wird. Daher ist die verbesserte Behandlung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung in dieser Arbeit ein deutlicher Fortschritt gegenüber anderen Theorien.

## 2 Der Keldysh-Formalismus

Quantenfeldtheoretische Methoden werden seit fast 50 Jahren sehr erfolgreich innerhalb der theoretischen Festkörperphysik angewendet [68, 69, 70]. Insbesondere die Methode der Greenschen Funktionen hat sich als sehr mächtiges Werkzeug erwiesen, mit dessen Hilfe sich viele experimentell relevante Größen berechnen lassen [71, 72, 73]. Bei der üblichen Formulierung der Vielteilchentheorie ist man allerdings auf das thermodynamische Gleichgewicht beschränkt. Gerade die Transporterscheinungen, die aktuell immenses Interesse auf sich ziehen [5, 74], sind aber grundsätzlich immer Folge von Nichtgleichgewichtsphänomenen. Man kann sie zwar innerhalb der sogenannten Linear-Response-Theorie zumindest näherungsweise in den Gleichgewichtsformalismus einbinden, allerdings mit dem Nachteil, dass man sich dabei auf linearen Einfluss der Störung beschränken muss. Für schwache Störungen des Gleichgewichts lassen sich mit dieser Methode durchaus sehr gute Ergebnisse erzielen [75, 76]. Für Systeme, die sich weit entfernt von ihrem Gleichgewichtszustand befinden, wird sie aber üblicherweise versagen. Man benötigt also eine Erweiterung des Formalismus, die auch in der Lage ist mit Nichtgleichgewichtszuständen umzugehen. Es gibt in der Literatur mehrere Zugangsarten zu einem solchen Nichtgleichgewichtsformalismus. Die beiden wichtigsten gehen einerseits auf Kadanoff und Baym [70] und andererseits auf Keldysh [77] zurück. In dieser Arbeit wird ausschließlich der Keldysh-Formalismus verwendet, da er recht einfach zu formulieren ist und eine sehr große Ähnlichkeit zur Gleichgewichtsvielteilchentheorie besitzt, so dass viele bekannte Ergebnisse unmittelbar übernommen werden können.

Ziel dieses Kapitels ist es, eine kurze Darstellung des Keldysh-Formalismus, seiner wesentlichen Eigenschaften und insbesondere natürlich seiner praktischen Anwendung zu geben. Dabei wird der Formalismus nur so weit entwickelt, wie er für das Verständnis der vorliegenden Arbeit benötigt wird. Es geht also nicht um eine vollständige Darstellung des gesamten Formalismus, da viele Anwendungsbereiche, wie z.B. die explizit zeitabhängigen Störungen, für die folgenden Kapitel keine Rolle spielen werden. Weiterhin wird die Gleichgewichtsvielteilchentheorie als bekannt vorausgesetzt, um die Darstellung möglichst kompakt zu halten.

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels werden die für die Diskussion des Formalismus benötigten Größen definiert und ihr Zusammenhang mit bekannten Gleichgewichtsgrößen diskutiert. Im darauffolgenden Abschnitt werden analytische Fortsetzungsregeln bewiesen, die für die praktische Arbeit unerlässlich sind. Anschließend wird mit der Keldysh-Gleichung die grundlegende Bewegungsgleichung des Formalismus abgeleitet. Im letzten Abschnitt werden dann noch die wesentlichen Unterschiede zur Gleichgewichtstheorie diskutiert.

## 2.1 Definition

Ausgangspunkt der Beschreibung ist ein physikalisches System, das durch den folgenden zeitabhängigen Hamilton-Operator beschrieben werden soll:

$$\mathcal{H}(t) = H + V(t) = H_0 + H_{int} + V(t) \quad (2.1)$$

Die Einzelterm des Hamilton-Operators sind dabei so gewählt, dass das Eigenwertproblem zu  $H_0$  exakt lösbar ist und  $H_{int}$  die Wechselwirkungen des Systems enthält. Der Term  $V(t)$  stellt eine zusätzliche Störung dar, die das System aus dem thermodynamischen Gleichgewicht bringt. Er soll erst ab einem gewissen Zeitpunkt  $t_0$  wirken, so dass sich das System für Zeiten  $t < t_0$  im thermodynamischen Gleichgewicht befindet. Die Art der Störung kann vielfältiger Natur sein. Einige Möglichkeiten wären z.B. ein elektrisches oder magnetisches Feld, ein Laserpuls oder die Kopplung von Regionen mit unterschiedlichen Temperaturen oder chemischen Potentialen. Insbesondere letztere Störung wird in dieser Arbeit von Interesse sein. Im Weiteren wird immer  $t_0 \rightarrow -\infty$  angenommen, d.h. die Störung wirke bereits eine unendlich lange Zeit. Durch diese Annahme wird die Formulierung des Formalismus deutlich vereinfacht, wobei sie allerdings den Nachteil besitzt, dass dadurch eventuelle anfängliche Korrelationen des Systems komplett vernachlässigt werden [78]. Da in dieser Arbeit ausschließlich stationäre, d.h. zeitunabhängige, Phänomene untersucht werden, spielen solche Korrelationen aber sowieso keine Rolle, daher ist ihre Vernachlässigung durchaus gerechtfertigt [60].

Die Berechnung von Erwartungswerten stellt eine zentrale Aufgabe der Vielteilchentheorie dar, die mit Hilfe des Greenfunktionsformalismus gelöst werden kann. Dazu wird zunächst die kausale Greenfunktion definiert:

$$G_{AB}^c(t, t') = -i \langle \mathcal{T} A(t) B(t') \rangle \quad (2.2)$$

Dabei bezeichnen  $A$  und  $B$  quantenmechanische Operatoren in ihrer zeitabhängigen Heisenberg-Darstellung.  $\mathcal{T}$  ist der Wicksche Zeitordnungsoperator:

$$\mathcal{T} A(t) B(t') = \begin{cases} A(t) B(t') & \text{für } t > t' \\ \pm B(t') A(t) & \text{für } t < t' \end{cases} \quad (2.3)$$

Er ordnet die Operatoren so an, dass der Operator mit der kleineren Zeit immer am weitesten rechts steht. Das Vorzeichen im Fall  $t < t'$  hängt von der Art der Operatoren ab:  $+$  gilt für bosonische,  $-$  für fermionische Operatoren<sup>1</sup>. Die spitzen Klammern in der Definition der Greenfunktion stehen für die thermodynamische Mittelung. Im Gleichgewicht lässt sie sich über die Beziehung  $\langle A \rangle = Sp(\hat{\rho} A)$  mit Hilfe des statistischen Operators  $\hat{\rho}$  berechnen. Für diesen existieren, je nach verwendeter thermodynamischer Gesamtheit, verschiedene analytische Ausdrücke [79].

Bei der Berechnung der Greenfunktion spielt die Temperatur  $T$  eine große Rolle. Insbe-

---

<sup>1</sup>Bosonische (fermionische) Operatoren beschreiben Teilchen mit ganzzahligem (halbzahligem) Spin. Die hier verwendete Vorzeichenkonvention ist nicht zwingend, erweist sich üblicherweise aber als zweckmäßig [71].

sondere der Fall  $T = 0$  ist dabei hervorzuheben, da dort ein eindeutiger Grundzustand  $|\psi_0\rangle$  existiert, in dem sich das System befinden wird, solange es nicht gestört wird. Daher muss die thermodynamische Mittelung nur über diesen einen Zustand durchgeführt werden, was die Berechnung natürlich deutlich vereinfacht [71]. Bei endlichen Temperaturen ist dies nicht mehr möglich, da aufgrund von thermischen Anregungen auch höherenergetische Zustände besetzt werden können. Die Mittelung kann allerdings auf andere Weise vereinfacht werden, indem man nämlich erkennt, dass eine formale Ähnlichkeit zwischen dem, in die komplexe Zeitebene fortgesetzten, Zeitentwicklungsoperator  $U(t, t_0) = \exp(-i(H - \mu\hat{N})(t - t_0))$  und dem großkanonischen statistischen Operator  $\hat{\rho} = \frac{1}{\Xi} \exp(-\beta(H - \mu\hat{N}))$  besteht. Dabei ist  $\Xi = \text{Sp}(\exp(-\beta(H - \mu\hat{N})))$  die großkanonische Zustandssumme,  $\beta = 1/(k_B T)$  die inverse Temperatur,  $\mu$  das chemische Potential und  $\hat{N}$  der Teilchenzahloperator. Diese Erkenntnis ist der Ausgangspunkt des sogenannten Matsubara-Formalismus [80], der eine systematische Störungstheorie auch bei endlichen Temperaturen ermöglicht. Beide Versionen der Vielteilchentheorie sind sehr erfolgreich bei der Beschreibung der thermodynamischen Eigenschaften eines Systems im Gleichgewicht, versagen jedoch sobald das Gleichgewicht verlassen wird. Im Nichtgleichgewicht kann nämlich weder davon ausgegangen werden, dass das System sich durchgehend im Grundzustand befindet, noch dass der statistische Operator die übliche Gestalt hat. Somit ist eine Erweiterung des Formalismus nötig, die auf diese beiden Annahmen verzichten kann.

Der erste Schritt zur Beschreibung des Nichtgleichgewichtsformalismus besteht in der Definition einer Nichtgleichgewichtsgreenfunktion (NEGF) [60, 73, 81, 62]:

$$G_{AB}(t, t') = -i\langle\psi|T A(t)B(t')|\psi\rangle \quad (2.4)$$

Diese Definition hat große Ähnlichkeit mit derjenigen der kausalen Gleichgewichtsgreenfunktion in Gl. (2.2). Der Unterschied besteht darin, dass die Mittelung nun über einen beliebigen Zustand  $|\psi\rangle$  erfolgt. Dieser muss also selbst bei  $T = 0$  nicht mit dem Grundzustand übereinstimmen. Um eine systematische Störungstheorie zu entwickeln ist das bisher verwendete Heisenberg-Bild nicht sehr günstig. Eine bessere Wahl ist das Dirac-Bild, da dort die Dynamik der Operatoren allein durch den ungestörten Hamilton-Operator  $H$  bestimmt wird, während die Störung  $V(t)$  die zeitliche Entwicklung der Zustände bestimmt. Für die Transformationen zwischen den beiden Bildern gelten folgende Beziehungen [82]:

$$A_H(t) = U_S^{-1}(t, t_0)U_0(t, t_0)A_D(t)U_0^{-1}(t, t_0)U_S(t, t_0) \quad (2.5)$$

$$|\psi_H\rangle = U_S^{-1}(t, t_0)U_0(t, t_0)|\psi_D(t)\rangle \quad (2.6)$$

wobei die Indizes  $H$  bzw.  $D$  jeweils für das Heisenberg- oder Dirac-Bild stehen.  $U_S(t, t_0)$  ist der Zeitentwicklungsoperator im Schrödinger-Bild, der für nicht explizit zeitabhängige Hamilton-Operatoren  $H$  die folgende Gestalt besitzt:

$$U_S(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)} \quad (2.7)$$

## 2 Der Keldysh-Formalismus

$U_0(t, t_0)$  ist der freie Zeitentwicklungsoperator, der fast genauso wie  $U_S$  aussieht; man muss lediglich in der obigen Definition den vollen durch den freien Hamilton-Operator  $H_0$  ersetzen. Beide Zeitentwicklungsoperatoren haben folgende wichtige Eigenschaften:

$$U(t, t_0) = U^+(t_0, t) = U^{-1}(t_0, t) \quad (2.8)$$

$$U(t, t_0) = U(t, t_1)U(t_1, t_0) \quad \forall t_1 \quad (2.9)$$

Weiterhin wird noch der Zeitentwicklungsoperator des Dirac-Bildes  $S(t, t')$  benötigt. Dieser lässt sich durch die bereits eingeführten Operatoren ausdrücken [82]:

$$S(t, t') = U_0^{-1}(t, t_0)U_S(t, t')U_0(t', t_0) \quad (2.10)$$

Setzt man diese Ausdrücke für die Operatoren in die Definition der NEGF ein, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} G_{AB}(t, t') &= -i\langle\psi_H|\mathcal{T}A_H(t)B_H(t')|\psi_H\rangle \\ &= -i\langle\psi_H|\mathcal{T}\left\{U_S^{-1}(t, t_0)U_0(t, t_0)A_D(t)U_0^{-1}(t, t_0)U_S(t, t_0)\times\right. \\ &\quad \left.\times U_S^{-1}(t', t_0)U_0(t', t_0)B_D(t')U_0^{-1}(t', t_0)U_S(t', t_0)\right\}|\psi_H\rangle \end{aligned} \quad (2.11)$$

Zwischen den Operatoren  $A_D$  und  $B_D$  erkennt man den Dirac-Zeitentwicklungsoperator. Da die Zustände im Heisenberg-Bild prinzipiell nicht von der Zeit abhängen, können sie ohne Probleme unter den Zeitordnungsoperator  $\mathcal{T}$  gebracht und anschließend über Gl. (2.6) in das Dirac-Bild transformiert werden:

$$\begin{aligned} G_{AB}(t, t') &= -i\mathcal{T}\left\{\langle\psi_D(t)|\underbrace{U_0^{-1}(t, t_0)U_S(t, t_0)U_S^{-1}(t, t_0)U_0(t, t_0)}_{=1}A_D(t)\times\right. \\ &\quad \left.\times S(t, t')B_D(t')\underbrace{U_0^{-1}(t', t_0)U_S(t', t_0)U_S^{-1}(t', t_0)U_0(t', t_0)}_{=1}|\psi_D(t')\rangle\right\} \\ &= -i\mathcal{T}\left\{\langle\psi_D(t)|A_D(t)S(t, t')B_D(t')|\psi_D(t')\rangle\right\} \end{aligned} \quad (2.12)$$

Damit wurde das Problem schon deutlich vereinfacht. Allerdings ist dieser Ausdruck nach wie vor ein wenig problematisch, da die Zustände noch unter dem Zeitordnungsoperator stehen. Mit Hilfe der allgemeinen Definition des Zeitentwicklungsoperators

$$|\psi_D(t')\rangle = S(t', t_0)|\psi_D(t_0)\rangle \quad (2.13)$$

lässt sich dies ändern, indem der linke Zustand bis zur Zeit  $t = \infty$  und der rechte Zustand bis  $t = -\infty$  entwickelt wird:

$$G_{AB}(t, t') = -i\mathcal{T}\left\{\langle\psi_D(\infty)|S(\infty, t)A_D(t)S(t, t')B_D(t')S(t', -\infty)|\psi_D(-\infty)\rangle\right\} \quad (2.14)$$



Da  $|\psi_0\rangle \equiv |\psi_D(t = -\infty)\rangle$  zur kleinsten möglichen Zeit auszuwerten ist, würde der Zustand vom Zeitordnungsoperator ganz nach rechts geschoben. Analog dazu würde  $\langle\psi_D(t = \infty)|$  ganz nach links geordnet. Sie können daher unter dem Zeitordnungsoperator herausgezogen werden. Weiterhin können die Operatoren beliebig vertauscht werden, da der Zeitordnungsoperator sie am Ende automatisch in die richtige zeitliche Reihenfolge bringt. Ordnet man alle Zeitentwicklungsoperatoren nach links, können sie mit Hilfe der Beziehung (2.9) zusammengefasst werden<sup>2</sup>. Somit ergibt sich insgesamt für die Greenfunktion in Dirac-Darstellung:

$$G_{AB}(t, t') = -i\langle\psi(\infty)|\mathcal{T}\{S(\infty, -\infty)A(t)B(t')\}|\psi_0\rangle \quad (2.15)$$

Für die praktische Verwendung wird dieser Ausdruck allerdings immer noch problematisch sein, da der Zustand  $|\psi(\infty)\rangle$  üblicherweise nicht bekannt ist. Im Gleichgewicht wird dieses Problem durch das sogenannte Gell-Man-Low-Theorem gelöst [83]. Dessen Grundaussage lautet, dass das System nach (adiabatischem) Abschalten der Wechselwirkung wieder, bis auf einen eventuellen Phasenfaktor, in den ursprünglichen Zustand übergeht, d.h.

$$|\psi(\infty)\rangle \propto |\psi_0\rangle. \quad (2.16)$$

Der Phasenfaktor kann dabei durch entsprechende Normierung herausgekürzt werden. Wesentliche Voraussetzung zum Beweis dieses Theorems ist, dass sich die Wechselwirkung adiabatisch anschalten lässt, so dass das System zu jedem Zeitpunkt in seinem Grundzustand verbleibt. Außerhalb des thermodynamischen Gleichgewichts erscheint diese Annahme natürlich höchst fragwürdig. Da das System stark gestört wird, ist kaum davon auszugehen, dass es sich nach Abschalten der Wechselwirkung wieder im ursprünglichen Ausgangszustand befinden wird. Das Gell-Man-Low-Theorem kann also nicht verwendet werden, um den Zustand  $|\psi(\infty)\rangle$  auf  $|\psi_0\rangle$  zurückzuführen. Die einzige Möglichkeit dies trotzdem zu erreichen, ist eine erneute Verwendung des Zeitentwicklungsoperators, da nach Definition offensichtlich gilt:

$$|\psi(\infty)\rangle = S(\infty, -\infty)|\psi(-\infty)\rangle = S(\infty, -\infty)|\psi_0\rangle \quad (2.17)$$

Durch Einsetzen dieses Zustands in den Ausdruck für die Greenfunktion erhält man

$$G_{AB}(t, t') = -i\langle\psi_0|S^+(\infty, -\infty)\mathcal{T}S(\infty, -\infty)A(t)B(t')|\psi_0\rangle \quad (2.18)$$

Damit ist es also in der Tat gelungen den Zustand  $|\psi(\infty)\rangle$  zu eliminieren, aber dafür erscheint nun der zu mittelnde Ausdruck reichlich kompliziert. Bereits die Entwicklung der Gleichgewichtsstörungstheorie, in der aufgrund der Verwendung des Gell-Man-Low-Theorems nur ein Zeitentwicklungsoperator auftaucht, ist keine triviale Angelegenheit [71]. Letztlich lässt sie sich nur wegen den bereits erwähnten speziellen Eigenschaften

---

<sup>2</sup>Dabei tritt auch für fermionische Operatoren kein zusätzliches Vorzeichen auf, da  $S(t, t')$  im Wesentlichen aus dem Nichtgleichgewichtsterm  $V(t)$  besteht (vgl. Gl. (2.19)). Für Fermionen besteht dieser immer aus einer geraden Anzahl von Operatoren [71], wodurch es auch nur zu einer geraden Anzahl von Vertauschungen kommen kann.

## 2 Der Keldysh-Formalismus

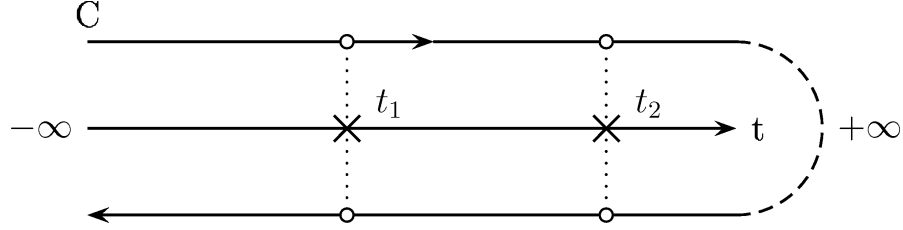


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Keldysh-Kontur C

der Gleichgewichtssysteme, also der Eindeutigkeit des Grundzustands bei  $T = 0$  bzw. der formalen Ähnlichkeit zwischen Zeitentwicklungs- und statistischem Operator, überhaupt durchführen. Da beide Voraussetzungen im Nichtgleichgewicht nicht mehr gelten und zusätzlich noch ein zweiter Zeitentwicklungsoperator auftritt, erscheint das Problem zunächst unlösbar. Und in der Tat bedurfte es eines Nobelpreisträgers, um den entscheidenden Schritt zur Lösung zu gehen. Julian Schwinger hatte die geniale Idee, beide Zeitentwicklungsoperatoren formal zu einem Konturordnungsoperator zusammenzufassen [69]. Diese Idee wurde später von Keldysh übernommen, der sie in der hier vorgestellten Form verwendete [77].

Der rechte Zeitentwicklungsoperator  $S(\infty, -\infty)$  stellt die Entwicklung des Systems vom Zeitpunkt  $t = -\infty$  nach  $t = \infty$  dar, während der linke Zeitentwicklungsoperator genau die umgekehrte Richtung beschreibt. Die gesamte Entwicklung des Systems folgt somit der in Abb. 2.1 gezeigten Kontur. Da der linke Zeitordnungsoperator adjungiert werden muss, sind die Zeiten auf dem unteren Ast der Kontur antizeitgeordnet. Anhand der Bewegungsgleichung des Zeitentwicklungsoperators, die hier nicht explizit abgeleitet werden soll, lassen sich folgende Ausdrücke zeigen [82]:

$$S(\infty, -\infty) = \mathcal{T} \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{\infty} dt V(t) \right\} \quad (2.19)$$

$$S^+(\infty, -\infty) = \tilde{\mathcal{T}} \exp \left\{ i \int_{-\infty}^{\infty} dt V(t) \right\} \quad (2.20)$$

$\tilde{\mathcal{T}}$  ist der Antizeitordnungsoperator, der die Operatoren genau in die umgekehrte zeitliche Reihenfolge wie der Zeitordnungsoperator bringt:

$$\tilde{\mathcal{T}} A(t) B(t') = \begin{cases} A(t) B(t') & \text{für } t < t' \\ \pm B(t') A(t) & \text{für } t > t' \end{cases} \quad (2.21)$$

Man kann somit die Operatoren  $S^+(\infty, -\infty)$ ,  $S(\infty, -\infty)$  und  $\mathcal{T}$  formal durch einen einzigen Konturordnungsoperator  $\mathcal{T}_C$  ersetzen, der die Zeiten entlang der Kontur C ordnet. Die Greenfunktion hat dann die folgende Gestalt:

$$G_{AB}(t, t') = -i \langle \psi_0 | \mathcal{T}_C A(t) B(t') | \psi_0 \rangle, \quad (2.22)$$

wobei die Operatoren  $A$  und  $B$  nun wieder im Heisenberg-Bild stehen. Da  $|\psi_0\rangle$  der Zustand *vor* dem Einschalten der Störung  $V(t)$  ist, handelt es sich um einen Gleichgewichtszustand. Daher kann die thermodynamische Mittelung mit Hilfe des üblichen statistischen Operators im Gleichgewicht durchgeführt werden. Damit gilt also:

$$G_{AB}(t, t') = -i\langle \mathcal{T}_C A(t) B(t') \rangle \quad (2.23)$$

Vergleicht man diesen Ausdruck für die NEGF mit der Definition der kausalen Gleichgewichtsgreenfunktion in Gl. (2.2), so erkennt man eine große formale Ähnlichkeit zwischen beiden. Es muss lediglich der Zeitordnungsoperator durch den Konturordnungsoperator ersetzt werden. Dies ist einer der Hauptgründe für den großen Erfolg des Keldysh-Formalismus, da man alle Erkenntnisse, die man über die kausale Greenfunktion gesammelt hat, unmittelbar auf die NEGF übertragen kann, indem man diese Ersetzung vornimmt. Dies soll hier am Beispiel der Dyson-Gleichung beispielhaft vorgeführt werden. Das System befinde sich dazu zunächst im Gleichgewicht, beschrieben durch den Hamilton-Operator  $H = H_0 + H_{int}$ , wobei wie üblich das Eigenwertproblem zu  $H_0$  exakt lösbar sei und  $H_{int}$  die Wechselwirkungen enthalte, die eine exakte Lösung des Gesamtproblems unmöglich machen. Um eine zumindest approximative Lösung zu erhalten, postuliert man folgende Zerlegung:

$$\langle \langle [A, H_{int}]_-(t); B(t') \rangle \rangle^c \equiv \int dt_1 \Sigma_{AB}^c(t, t_1) G_{AB}^c(t_1, t') \quad (2.24)$$

Sofern eine solche Zerlegung in die sogenannte Selbstenergie  $\Sigma_{AB}^c(t, t')$  und die kausale Greenfunktion gelingt, ist das Problem praktisch gelöst. Man kann nämlich zeigen, dass die kausale Greenfunktion die Dyson-Gleichung [71]

$$G_{AB}^c(t, t') = g_{AB}^c(t, t') + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 g_{AB}^c(t, t_1) \Sigma_{AB}^c(t_1, t_2) G_{AB}^c(t_2, t') \quad (2.25)$$

erfüllt. Dabei ist  $g_{AB}^c(t, t')$  die (üblicherweise leicht berechenbare) Greenfunktion des freien Systems, das nur durch  $H_0$  beschrieben wird. Dies sind wohlbekannte Ergebnisse der Gleichgewichtsvielteilchentheorie. Der Übergang zum Nichtgleichgewicht erfolgt durch die Ersetzung der Zeitintegration durch Integration entlang der Kontur  $C$ . Für die NEGF gilt somit eine analoge Dyson-Gleichung:

$$G_{AB}(t, t') = g_{AB}(t, t') + \int_C d\tau_1 d\tau_2 g_{AB}(t, \tau_1) \Sigma_{AB}(\tau_1, \tau_2) G_{AB}(\tau_2, t') \quad (2.26)$$

Damit kann auch das entsprechende Nichtgleichgewichtsproblem als prinzipiell gelöst gelten, falls es gelingt eine (Nichtgleichgewichts-)Selbstenergie zu finden.

Für die konkrete Auswertung der NEGF muss unterschieden werden, auf welchem der beiden Konturäste sich die beiden Zeiten befinden. Da es sich um eine zweizeitige Funktion handelt, gibt es somit insgesamt vier Möglichkeiten die Zeiten auf den Ästen anzuordnen. Diesen vier Möglichkeiten entsprechen vier verschiedene Greenfunktionen. Bezeichnet man den oberen Ast mit  $C_1$  und den unteren entsprechend mit  $C_2$ , so lassen sie

## 2 Der Keldysh-Formalismus

sich folgendermaßen zusammenfassen:

$$G_{AB}(t, t') = \begin{cases} G_{AB}^c(t, t') & t, t' \in C_1 \\ G_{AB}^>(t, t') & t \in C_2, t' \in C_1 \\ G_{AB}^<(t, t') & t \in C_1, t' \in C_2 \\ G_{AB}^{\tilde{c}}(t, t') & t, t' \in C_2 \end{cases} \quad (2.27)$$

An dem Ausdruck (2.23) für die NEGF kann man unter Berücksichtigung des Umlaufsinnes der Kontur folgende Ausdrücke für die Greenfunktionen auf der rechten Seite ablesen, die für fermionische Operatoren  $A$  und  $B$  gelten:

$$G_{AB}^c(t, t') = -i\langle \mathcal{T} A(t) B(t') \rangle \quad (2.28)$$

$$G_{AB}^>(t, t') = -i\langle A(t) B(t') \rangle \quad (2.29)$$

$$G_{AB}^<(t, t') = +i\langle B(t') A(t) \rangle \quad (2.30)$$

$$G_{AB}^{\tilde{c}}(t, t') = -i\langle \tilde{\mathcal{T}} A(t) B(t') \rangle \quad (2.31)$$

Auf dem oberen Ast  $C_1$  sind die Zeiten zeitgeordnet, daher muss in der ersten Gleichung der Zeitordnungsoperator explizit auftauchen. In diesem Fall reproduziert die NEGF die bereits eingeführte kausale Greenfunktion. Falls die Zeiten auf verschiedenen Ästen liegen, ist der Zeitordnungsoperator nicht mehr nötig, da dann bereits per Voraussetzung klar ist, welche Zeit zuerst durchlaufen wird, nämlich die auf dem oberen Ast  $C_1$ . Daher sind die Operatoren im Fall der sogenannten größeren Greenfunktion  $G_{AB}^>(t, t')$  bereits in der richtigen zeitlichen Reihenfolge. Bei der kleineren Greenfunktion  $G_{AB}^<(t, t')$  muss die Reihenfolge der Operatoren allerdings vertauscht werden, da  $t$  auf dem oberen Ast liegt und  $A(t)$  somit zuerst ausgeführt werden muss. Durch die Vertauschung entsteht das zusätzliche Vorzeichen. Auf dem unteren Ast werden größere Zeiten zuerst durchlaufen, daher müssen die Operatoren, um das korrekte Verhalten sicherzustellen, antizeitgeordnet werden, und es ergibt sich die antikausale Greenfunktion.

Im Gleichgewichtsformalismus spielen neben der kausalen noch die retardierten und avancierten Greenfunktionen eine zentrale Rolle. Deren Definitionen können auch im Nichtgleichgewicht unmittelbar übernommen werden [71]:

$$G^r(t, t') = -i\theta(t - t')\langle [A(t), B(t')]_+ \rangle \quad (2.32)$$

$$G^a(t, t') = i\theta(t' - t)\langle [A(t), B(t')]_+ \rangle \quad (2.33)$$

Dabei bezeichnet  $\theta(t - t')$  die Stufenfunktion. Damit hat man sechs verschiedene Greenfunktionen zur Verfügung. Allerdings erkennt man relativ schnell, dass sie nicht alle unabhängig voneinander sind. Durch Einsetzen ihrer Definitionen lassen sich folgende

| Kontur           | Reelle Achse   |
|------------------|--|
| $C = \int_C AB$  | $C^< = \int_t (A^r B^< + A^< B^a)$                       |
|                  | $C^> = \int_t (A^r B^> + A^> B^a)$                       |
|                  | $C^r = \int_t A^r B^r$                                   |
| $D = \int_C ABC$ | $D^< = \int_t (A^r B^r C^< + A^r B^< C^a + A^< B^a C^a)$ |
|                  | $D^r = \int_t A^r B^r C^r$                               |

Tabelle 2.1: Analytische Fortsetzungsregeln

nützliche Beziehungen sehr leicht beweisen [60, 73]:

$$G^r(t, t') = \theta(t - t') (G^>(t, t') - G^<(t, t')) \quad (2.34)$$

$$\begin{aligned} G^a(t, t') &= (G^r(t, t'))^* \\ &= \theta(t' - t) (G^<(t, t') - G^>(t, t')) \end{aligned} \quad (2.35)$$

$$G^c(t, t') + G^{\tilde{c}}(t, t') = G^<(t, t') + G^>(t, t') \quad (2.36)$$

$$G^r(t, t') - G^a(t, t') = G^>(t, t') - G^<(t, t') \quad (2.37)$$

$$G^r(t, t') = G^c(t, t') - G^<(t, t') = G^>(t, t') - G^{\tilde{c}}(t, t') \quad (2.38)$$

$$G^a(t, t') = G^c(t, t') - G^>(t, t') = G^<(t, t') - G^{\tilde{c}}(t, t') \quad (2.39)$$

Zur konkreten Lösung eines Problems reicht es somit aus, einen Teil dieser sechs Greenfunktionen zu berechnen. Die anderen folgen dann unmittelbar aus den obigen Beziehungen. Für die vorliegende Arbeit werden sich insbesondere die retardierten, avancierten und kleineren Greenfunktionen als wesentlich erweisen.

## 2.2 Analytische Fortsetzungsregeln

Die NEGF kann, sofern die Selbstenergie bekannt ist, über die Dyson-Gleichung (2.26) berechnet werden. Allerdings ist zunächst nicht unmittelbar ersichtlich, wie Konturintegrationen konkret auszuführen sind. Man benötigt somit ein Verfahren, um Terme wie

$$C(t, t') = \int_C d\tau A(t, \tau) B(\tau, t') \quad (2.40)$$

und entsprechende Verallgemeinerungen auf höhere Produkte zu berechnen. Dabei wäre es natürlich insbesondere von Vorteil, die Konturintegration wieder auf eine einfache Zeitintegration zurückführen zu können. Ein solches Verfahren wurde von David Langreth entwickelt und ist als analytische Fortsetzung (von der Kontur auf die Zeitachse) bekannt [84]. In Tabelle 2.1 sind die Regeln angegeben, die für die Auswertung des theoretischen Modells im nächsten Kapitel eine Rolle spielen werden. Um die Notation möglichst kompakt zu halten, wurden dabei die Zeitargumente unterdrückt. Bei Produkten wird immer über innere Zeiten integriert, der Ausdruck  $C = \int_C AB$  entspricht also dem Integral  $C(t, t') = \int_C d\tau A(t, \tau) B(\tau, t')$  usw. Die linke Spalte enthält die allgemeinen Konturintegrale für die NEGF. Interessiert man sich beispielsweise für die kleinere Greenfunktion,

## 2 Der Keldysh-Formalismus

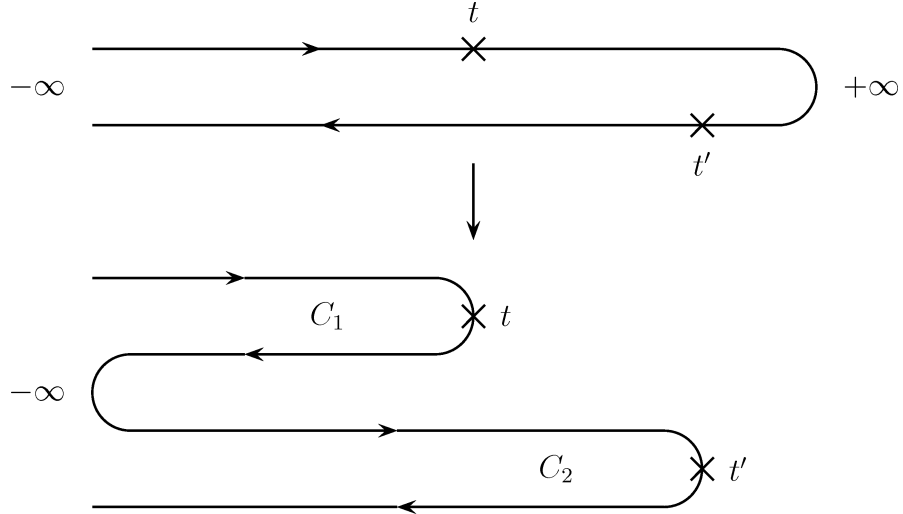


Abbildung 2.2: Deformation der Kontur zum Beweis der ersten analytischen Fortsetzungsregel

so muss man lediglich die Produkte der NEGFs durch die angegebenen Kombinationen von kleineren, retardierten und avancierten Greenfunktionen auf der rechten Seite ersetzen und über die reelle Zeitachse integrieren. Da diese Regeln von zentraler Bedeutung für die praktische Verwendung des Formalismus sind, sollen nun die ersten drei für ein Produkt aus zwei Greenfunktionen explizit bewiesen werden [60]. Gegeben sei also das Integral  $C(t, t') = \int_C d\tau A(t, \tau) B(\tau, t')$  und die Aufgabe besteht darin  $C^<(t, t')$ ,  $C^>(t, t')$  und  $C^r(t, t')$  zu berechnen.

Die kleinere Greenfunktion wurde im letzten Abschnitt so definiert, dass die erste Zeit  $t$  auf dem oberen und die zweite Zeit  $t'$  auf dem unteren Ast der Kontur liegt. Diese Situation ist im oberen Teil von Abb. 2.2 schematisch dargestellt. Durch Deformation lässt sich die Kontur in die untere Form bringen, da sich die Beiträge zwischen den Operatoren mit unterschiedlichem Umlaufsinn gegenseitig wegheben. Dies lässt sich leicht mit Hilfe der Eigenschaft (2.9) des Zeitordnungsoperators beweisen. Man startet mit dem mathematischen Ausdruck für die obere Kontur:

$$\begin{aligned} S(-\infty, t') Y(t') S(t', \infty) S(\infty, t) X(t) S(t, -\infty) &= \\ &= S(-\infty, t') Y(t') S(t', t) X(t) S(t, -\infty) \\ &= S(-\infty, t') Y(t') S(t', -\infty) S(-\infty, t) X(t) S(t, -\infty) \end{aligned} \quad (2.41)$$

$X$  und  $Y$  sind dabei Konstruktionsoperatoren, die die beiden Greenfunktionen  $A(t, t')$  und  $B(t, t')$  aufbauen. Die grafische Darstellung des letzten Ausdrucks entspricht genau der unteren Kontur in Abb. 2.2, die somit zur Ausgangskontur  $C$  äquivalent ist. Sie setzt sich wiederum aus zwei Teilkonturen  $C_1$  und  $C_2$  zusammen. Damit kann das Integral

aufgespalten werden:

$$C^<(t, t') = \int_{C_1} d\tau A(t, \tau) B^<(\tau, t') + \int_{C_2} d\tau A^<(t, \tau) B(\tau, t') \quad (2.42)$$

Im ersten Integral muss es sich bei  $B$  um eine kleinere Greenfunktion handeln, da alle  $\tau \in C_1$  immer vor  $t'$  durchlaufen werden und somit keine Zeitordnung benötigt wird. Analog dazu muss es sich bei  $A$  im zweiten Integral ebenfalls um eine kleinere Greenfunktion handeln, da  $t$  ja bereits durchlaufen wurde. Das erste Integral kann auf ganz ähnliche Weise weiter aufgespalten werden, indem man den Weg  $C_1$  in zwei Teilstücke zerlegt, die von  $-\infty$  bis  $t$  bzw. umgekehrt verlaufen:

$$\begin{aligned} \int_{C_1} A(t, \tau) B^<(\tau, t') &= \int_{-\infty}^t dt_1 A^>(t, t_1) B^<(t_1, t') + \\ &\quad + \int_t^{-\infty} dt_1 A^<(t, t_1) B^<(t_1, t') \\ &= \int_{-\infty}^t dt_1 \{A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1)\} B^<(t_1, t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \theta(t - t_1) \{A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1)\} B^<(t_1, t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 A^r(t, t_1) B^<(t_1, t') \end{aligned} \quad (2.43)$$

Im letzten Schritt wurde der Ausdruck (2.34) für die retardierte Greenfunktion verwendet. Das zweite Integral lässt sich auf analoge Weise umformen und es ergibt sich für die kleinere Greenfunktion:

$$C^<(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \{A^r(t, t_1) B^<(t_1, t') + A^<(t, t_1) B^a(t_1, t')\} \quad (2.44)$$

Damit wurde die erste Regel aus Tab. 2.1 bewiesen. Der Beweis der zweiten Regel erfolgt vollkommen analog dazu, es müssen lediglich die Indizes  $<$  und  $>$  vertauscht werden. Mit Hilfe dieser beiden Regeln lässt sich auch die dritte durch einige einfache algebraischen Umformungen zeigen. Dazu startet man mit dem Ausdruck (2.34) für die retardierte Greenfunktion und ersetzt die kleinere bzw. größere Greenfunktion jeweils durch die entsprechende Regel:

$$\begin{aligned} C^r(t, t') &= \theta(t - t') (C^>(t, t') - C^<(t, t')) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \theta(t - t') \left[ A^r(t, t_1) B^>(t_1, t') + A^>(t, t_1) B^a(t_1, t') - \right. \\ &\quad \left. - A^r(t, t_1) B^<(t_1, t') - A^<(t, t_1) B^a(t_1, t') \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \theta(t - t') \left[ (A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1)) B^a(t_1, t') + \right. \\ &\quad \left. + A^r(t, t_1) (B^>(t_1, t') - B^<(t_1, t')) \right] \end{aligned} \quad (2.45)$$

## 2 Der Keldysh-Formalismus

Die avancierten und retardierten Funktionen im Integranden werden nun wiederum durch die Beziehungen (2.34) und (2.35) ersetzt:

$$\begin{aligned}
C^r(t, t') &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \theta(t - t') (A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1)) \times \\
&\quad \times (B^<(t_1, t') - B^>(t_1, t')) (\theta(t' - t_1) - \theta(t - t_1)) \\
&= \int_{-\infty}^{t'} dt_1 \theta(t - t') (A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1)) (B^<(t_1, t') - B^>(t_1, t')) - \\
&\quad - \int_{-\infty}^t dt_1 \theta(t - t') (A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1)) (B^<(t_1, t') - B^>(t_1, t')) \\
&= \int_{t'}^t dt_1 \theta(t - t') (A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1)) (B^>(t_1, t') - B^<(t_1, t')) \quad (2.46)
\end{aligned}$$

Im letzten Schritt konnten die beiden Integrale zusammengefasst werden, da die Stufenfunktion nur für  $t > t'$  von Null verschieden ist. Mit der allgemeinen Eigenschaft  $\theta(t - t') = \theta(t - t_1)\theta(t_1 - t')$ , die für beliebige  $t_1$  gilt, lässt sich die Stufenfunktion so aufspalten, dass nur noch retardierte Größen im Integranden vorkommen:

$$\begin{aligned}
C^r(t, t') &= \int_{t'}^t dt_1 \theta(t - t_1) (A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1)) \times \\
&\quad \times \theta(t_1 - t') (B^>(t_1, t') - B^<(t_1, t')) \\
&\stackrel{(2.34)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 A^r(t, t_1) B^r(t_1, t') \quad (2.47)
\end{aligned}$$

Damit ist schließlich auch die dritte Regel bewiesen. Die analytischen Fortsetzungen für höhere Produkte sind lediglich Erweiterungen der bisher bewiesenen Beziehungen und sollen daher an dieser Stelle nicht explizit gezeigt werden.

## 2.3 Die Keldysh-Gleichung

In den letzten beiden Abschnitten wurden wesentliche Eigenschaften des Keldysh-Formalismus vorgestellt. Zur Lösung einer konkreten Problemstellung benötigt man aber noch die entsprechenden Bewegungsgleichungen. Wie bereits begründet wurde, besitzen die kausale Greenfunktion und die NEGF formal dieselbe Störungsentwicklung, wodurch geschlossen werden kann, dass die NEGF ebenfalls eine Dyson-Gleichung erfüllt:

$$G = g + g\Sigma G \quad (2.48)$$

Dabei bezeichnet  $g$  die freie und  $G$  die volle Greenfunktion und  $\Sigma$  ist die Selbstenergie. Zur besseren Übersicht werden in diesem Abschnitt wiederum alle Argumente und Quantenzahlen der Greenfunktionen unterdrückt. Die angegebenen Relationen gelten sowohl für zeitabhängige als auch (nach Fouriertransformation) für energieabhängige Greenfunktionen. Für erstere sind Produkte von Größen wie üblich so zu verstehen, dass über innere Zeiten integriert wird. Was unter freier Greenfunktion zu verstehen ist, hängt von dem



jeweiligen Problem ab. Der gesamte Hamilton-Operator lautet  $\mathcal{H}(t) = H_0 + H_{int} + V(t)$ . Für viele Anwendungen liegt es nahe, die freie Greenfunktion so zu definieren, dass sie die Lösung des Systems, das alleine durch  $H_0$  beschrieben wird, darstellt. Damit hat „frei“ also die Bedeutung von wechselwirkungsfrei *und* im Gleichgewicht. Manchmal erweist es sich aber als günstiger die Wechselwirkung mit in die freie Greenfunktion aufzunehmen, d.h. sie soll dann Lösung des Systems  $H_0 + H_{int}$  sein. Das hat den Vorteil, dass es sich nach wie vor um eine Gleichgewichtsgröße handelt, da sie nicht von der Störung  $V(t)$  abhängt. Allerdings ist klar, dass diese Definition nur dann verwendet werden kann, wenn die Störung keinen unmittelbaren Einfluss auf die Wechselwirkung hat [85, 86]. Aus der allgemeinen Dyson-Gleichung für die NEGF lassen sich mit Hilfe der analytischen Fortsetzungsregeln aus Tab. 2.1 die Bestimmungsgleichungen für die retardierten und kleineren Greenfunktionen herleiten. Auf der rechten Seite steht nämlich ein Produkt von drei Größen, das über die Kontur integriert werden muss. Die Fortsetzungsregeln können damit zur Umwandlung des Integrals in ein normales Zeitintegral benutzt werden. Für die retardierte Komponente findet man unmittelbar:

$$G^r = g^r + g^r \Sigma^r G^r \quad (2.49)$$

Dies ist gerade die übliche Dyson-Gleichung für die retardierte Greenfunktion, die bereits aus dem Gleichgewichtsformalismus bekannt ist. Sie kann leicht nach der vollen Greenfunktion aufgelöst werden:

$$G^r = \frac{g^r}{1 - g^r \Sigma^r} = \frac{1}{(g^r)^{-1} - \Sigma^r} \quad (2.50)$$

Damit genügt die Kenntnis der freien Greenfunktion und der retardierten Selbstenergie zur vollständigen Berechnung der retardierten Greenfunktion. Für die kleinere Greenfunktion folgt nach analytischer Fortsetzung der Dyson-Gleichung mit Hilfe der vierten Regel aus Tab. 2.1:

$$G^< = g^< + g^r \Sigma^r G^< + g^r \Sigma^< G^a + g^< \Sigma^a G^a \quad (2.51)$$

Da  $G^<$  noch auf beiden Seiten vorkommt, handelt es sich hierbei allerdings noch nicht um das endgültige Ergebnis. Um eine geschlossene Form für  $G^<$  zu erhalten, bieten sich einige Umformungen dieser Gleichung an. Zunächst löst man sie nach  $G^<$  auf:

$$G^< = \frac{1}{1 - g^r \Sigma^r} g^< (1 + \Sigma^a G^a) + \underbrace{\frac{g^r}{1 - g^r \Sigma^r}}_{=G^r} \Sigma^< G^a \quad (2.52)$$

## 2 Der Keldysh-Formalismus

Im zweiten Term erkennt man die volle retardierte Greenfunktion. Zusätzlich lässt sich der erste Bruch noch weiter umformen:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{1 - g^r \Sigma^r} &= \frac{g^r}{1 - g^r \Sigma^r} (g^r)^{-1} \\
 &= G^r \left[ (g^r)^{-1} - \Sigma^r + \Sigma^r \right] \\
 &= G^r \left[ (G^r)^{-1} + \Sigma^r \right] \\
 &= 1 + G^r \Sigma^r
 \end{aligned} \tag{2.53}$$

Damit erhält man insgesamt die folgende Bestimmungsgleichung für die kleinere Greenfunktion:

$$G^< = (1 + G^r \Sigma^r) g^< (1 + \Sigma^a G^a) + G^r \Sigma^< G^a \tag{2.54}$$

Sie wird nach ihrem Entdecker Keldysh-Gleichung genannt [77]. Offenbar ist die Berechnung der kleineren Greenfunktion etwas aufwändiger, da zunächst die retardierten bzw. avancierten Funktionen und die kleinere Selbstenergie  $\Sigma^<$  bestimmt werden müssen. Außerdem wird die kleinere freie Greenfunktion  $g^<$  benötigt, deren Bestimmung allerdings üblicherweise kein Problem darstellt.

Die Keldysh-Gleichung kann in vielen Situationen noch weiter vereinfacht werden. Dazu benutzt man eine alternative, äquivalente Darstellung des ersten Terms:

$$(1 + G^r \Sigma^r) g^< (1 + \Sigma^a G^a) = G^r (g^r)^{-1} g^< (g^a)^{-1} G^a \tag{2.55}$$

Die kleinere Greenfunktion  $g^<$  ist im Gleichgewicht zu berechnen, daher folgt mit Hilfe des Spektraltheorems (vgl. die Diskussion im nächsten Abschnitt):

$$g^< \propto \text{Im } g^r \propto g^r - g^a \tag{2.56}$$

Damit gilt also:

$$(g^r)^{-1} g^< (g^a)^{-1} \propto (g^r)^{-1} (g^r - g^a) (g^a)^{-1} = (g^a)^{-1} - (g^r)^{-1} \tag{2.57}$$

Die typische Form einer freien Gleichgewichtsgreenfunktion in Energiedarstellung sieht folgendermaßen aus [71]:

$$g^{r(a)}(E) = \frac{1}{E - \epsilon - \Omega^{r(a)}} \tag{2.58}$$

$\epsilon$  entspricht dabei der Dispersion und  $\Omega^{r(a)}$  ist die (Gleichgewichts-)Selbstenergie. Für reelle Selbstenergien gilt  $\Omega^r \equiv \Omega^a$  und daher auch  $(g^a)^{-1} - (g^r)^{-1} \equiv 0$ . Der erste Term der Keldysh-Gleichung verschwindet in diesem Fall also. Wichtige Beispiele für Systeme mit reellen Selbstenergien sind der wechselwirkungsfreie Fall, viele Mean Field-Näherungen (Hubbard-Modell, Kondo-Gitter-Modell,...), aber auch einige darüberhinausgehende Näherungen, wie der in Kapitel 4 abgeleitete Nichtgleichgewichtsspektraldichteansatz. Für

diese Systeme lautet die Keldysh-Gleichung somit:

$$G^< = G^r \Sigma^< G^a \quad (2.59)$$

Da  $\Sigma$  im allgemeinen sowohl die durch  $H_{int}$  als auch die durch  $V(t)$  verursachten Selbstenergieanteile enthält, sind die freien Greenfunktionen wechselwirkungsfrei und die obige Formel ist anwendbar. Es gibt allerdings auch Fälle in denen es praktischer ist, einen Teil der Selbstenergie in die freie Greenfunktion aufzunehmen [85, 86]. Handelt es sich dabei um eine reelle Funktion, ist die vereinfachte Keldysh-Gleichung (2.59) nach wie vor korrekt. Für komplexe Selbstenergien muss allerdings mit der vollen Gleichung (2.54) gerechnet werden.

## 2.4 Unterschiede zum Gleichgewichtsformalismus

In diesem Kapitel wurden eine Vielzahl an verschiedenen Greenfunktionen eingeführt: kleinere, größere, kausale, antikausale, retardierte und avancierte. Bereits anhand ihrer Definition konnte man schließen, dass nicht alle immer nötig sein werden, da sie über die Relationen (2.34) bis (2.39) miteinander zusammenhängen. Ein vollständiger Satz von Greenfunktion, der in dieser Arbeit eine zentrale Rolle spielen wird, ist die retardierte Greenfunktion  $G^r$  und die kleinere Greenfunktion  $G^<$ . Aus diesen beiden Funktionen lassen sich alle weiteren über die angegebenen Beziehungen berechnen. Lässt sich die Zahl der benötigten Greenfunktionen unter Umständen noch weiter reduzieren? Im Gleichgewicht ist dies in der Tat möglich. Da die kleinere Greenfunktion bis auf einen unwesentlichen Faktor  $i$  mit der Korrelationsfunktion übereinstimmt, lässt sich das sogenannte Spektraltheorem [71] benutzen, um sie auf die retardierte Funktion zurückzuführen:

$$g_{AB}^<(t, t') = i \langle B(t') A(t) \rangle = -\frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E) \text{Im } g_{AB}^r(E) \exp(-iE(t - t')) \quad (2.60)$$

bzw. in Energiedarstellung

$$g_{AB}^<(E) = -2i f_-(E) \text{Im } g_{AB}^r(E) \quad (2.61)$$

Die Wahl der kleinen  $g$  zur Bezeichnung der Greenfunktionen soll symbolisieren, dass es sich hierbei um Gleichgewichtsbeziehungen handelt. Die Fermifunktion  $f_-(E) = (\exp(\beta(E - \mu)) + 1)^{-1}$  ist durch das chemische Potential  $\mu$  und die inverse Temperatur  $\beta = (k_B T)^{-1}$  gekennzeichnet. Damit gelingt es also tatsächlich, alle eingeführten Greenfunktionen auf eine einzige, nämlich die retardierte, zurückzuführen. Das vereinfacht die Berechnung natürlich beträchtlich, insbesondere dadurch, dass man neben der freien Greenfunktion, die üblicherweise natürlich einfach zu berechnen ist, nur noch eine Selbstenergie  $\Sigma^r$  benötigt.

Leider kann man im Nichtgleichgewicht nicht auf dieselbe Weise vorgehen, da das Spektraltheorem seine Gültigkeit verliert [85]. Dieser Umstand stellt wahrscheinlich die entscheidende Schwierigkeit bei der praktischen Arbeit mit dem Keldysh-Formalismus dar, da das Spektraltheorem an sehr vielen Stellen der Gleichgewichtstheorie verwendet wird,

## 2 Der Keldysh-Formalismus

die nun nicht mehr einfach übernommen werden können. Beispielsweise lässt sich folgender Ausdruck für die wichtige Observable Elektronenzahl  $N_e$  im Gleichgewicht finden:

$$N_e = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) \text{Im } g_{\mathbf{k}\sigma}^r(E) \quad (2.62)$$

Im Nichtgleichgewicht muss die Teilchenzahl  $N_e$  hingegen aus der kleineren Greenfunktion berechnet werden:

$$N_e = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE G_{\mathbf{k}\sigma}^{<}(E), \quad (2.63)$$

wobei  $G_{\mathbf{k}\sigma}^{<}$  über die Keldysh-Gleichung zu berechnen ist. Kompliziert wird die Angelegenheit dadurch, dass neben den retardierten und avancierten Selbstenergien auch noch die kleinere Selbstenergie auftritt, die im Gleichgewicht nicht benötigt wird. Im Nichtgleichgewicht hingegen ist sie eine eigenständige Größe, deren Bestimmung üblicherweise ähnlich schwierig wie die der retardierten Selbstenergie ist, da es nur wenige systematische Methoden, wie beispielsweise diagrammatische Störungstheorie, zu ihrer Berechnung gibt. Diagrammtechnik [71, 87] eignet sich besonders gut zur Verwendung innerhalb des Keldysh-Formalismus, da kausale Greenfunktion und NEGF formal dieselbe Störungsentwicklung besitzen. Außerdem lässt sich die diagrammatische Selbstenergie als Produkt von Greenfunktionen darstellen, auf das die analytischen Fortsetzungsregeln angewendet werden können, um die retardierten und kleineren Komponenten zu erhalten. Andererseits handelt es sich dabei natürlich um Störungstheorie, d.h. sie wird nur für relativ kleine Störungen glaubwürdige Ergebnisse liefern können. Für stark korrelierte Systeme ist man daher üblicherweise auf andere Verfahren angewiesen. Die Schwierigkeit besteht darin, diese Verfahren so zu gestalten, dass sich beide Selbstenergien  $\Sigma^r$  und  $\Sigma^{<}$  auf konsistente Weise berechnen lassen.

Eine oft verwendete Möglichkeit, dieses Problem zu umgehen, geht auf einen Ansatz von Ng zurück [88]. Ausgangspunkt ist die Beobachtung, dass sich die Selbstenergien ohne Wechselwirkung, d.h. für  $H_{int} \equiv 0$ , relativ leicht berechnen lassen [89]. Durch den Einfluss von  $V(t)$  sind sie, im Gegensatz zum Gleichgewicht, üblicherweise von Null verschieden. Ng postuliert, dass sich die Selbstenergien des vollen Problems durch Funktionen  $A(E)$  und  $B(E)$  aus den wechselwirkungsfreien Selbstenergien  $\Sigma_0^{<}$  und  $\Sigma_0^{>}$  entwickeln:

$$\Sigma^{<} = \Sigma_0^{<} A \quad \Sigma^{>} = \Sigma_0^{>} B \quad (2.64)$$

Damit hat man zunächst noch nichts gewonnen, da das Problem lediglich auf die Bestimmung der beiden Funktionen  $A$  und  $B$  verlagert wurde. Die zentrale Annahme besteht nun in der Forderung, dass  $A$  und  $B$  identisch sind, d.h.  $A \equiv B$ . Sowohl die kleinere als auch die größere Selbstenergie sollen sich also durch *dieselbe* Funktion  $A(E)$  aus ihrer wechselwirkungsfreien Lösung entwickeln.  $A(E)$  kann dann über die exakte Relation  $\Sigma^{<} - \Sigma^{>} = \Sigma^r - \Sigma^a$ , die analog zu Gl. (2.37) für die Greenfunktionen gilt, aus den, als bekannt vorausgesetzten, retardierten bzw. avancierten Selbstenergien berechnet werden. Man erhält für die kleinere Selbstenergie:

$$\Sigma^{<} = \Sigma_0^{<} (\Sigma_0^r - \Sigma_0^a)^{-1} (\Sigma^r - \Sigma^a) \quad (2.65)$$

## 2.4 Unterschiede zum Gleichgewichtsformalismus

Alle Größen auf der rechten Seite sind bekannt bzw. leicht berechenbar. Zwar ist die zentrale Annahme  $A \equiv B$  nicht beweisbar, nichtsdestotrotz wurde dieser Ansatz sehr erfolgreich auf eine ganze Reihe von (Transport-)Problemen angewendet. Ng selbst hat ihn verwendet, um das Tunneln durch Anderson-Störstellen zu untersuchen [88]. Andere Autoren haben damit unter anderem das Kondo-Problem im Nichtgleichgewicht [90], resonantes Andreev-Tunneln in stark korrelierten Quantenpunkten [91] und den spinpolarisierten Transport durch Quantenpunkte [89] modelliert.



### 3 Modellbeschreibung

Die theoretische Beschreibung eines Festkörpers ist ein kompliziertes Unterfangen. Er besteht aus sehr vielen Elektronen und Ionenrümpfen, die, zumindest im Prinzip, alle miteinander wechselwirken können. Damit ist es nicht möglich, das Standardverfahren der Quantenmechanik, nämlich die explizite Lösung der Schrödinger-Gleichung, zu verwenden. Man ist auf andere Verfahren angewiesen. Es haben sich im Wesentlichen zwei Herangehensweisen bewährt: sogenannte *ab initio*-Methoden, basierend auf der Dichtefunktionaltheorie (DFT), und die Modellbildung. Die DFT macht es sich zu Nutze, dass es gar nicht nötig ist, die vollständige Lösung der Schrödinger-Gleichung zu kennen, um Informationen über den Grundzustand eines physikalischen Systems zu erhalten [92]. Vielmehr genügt die Kenntnis der Grundzustandselektronendichte, um alle weiteren Eigenschaften zu berechnen (Hohenberg-Kohn-Theorem [93]). Mit Hilfe der DFT ist es gelungen, eine Vielzahl realer Festkörper quantitativ zu beschreiben. Allerdings kann sie, bis auf wenige Spezialfälle, nicht exakt gelöst werden. Es existieren eine Reihe von Näherungsverfahren zu ihrer Lösung, wobei als wohl bedeutendste die Lokale-Dichteanäherung (LDA) zu nennen ist [94]. Bei stark korrelierten Systemen versagt die LDA jedoch üblicherweise. Gerade in solchen Fällen hat sich dagegen die Modellbildung sehr bewährt. Ihr Ziel besteht darin, das Problem so weit zu idealisieren, dass nur noch die für den interessierenden physikalischen Effekt (vermutlich) verantwortlichen Komponenten betrachtet werden. Alle anderen Anteile des Festkörper-Hamilton-Operators werden vernachlässigt. Dies führt zu Modell-Hamilton-Operatoren, die typischerweise eine einfachere Struktur haben als der vollständige Hamilton-Operator. Damit ist es deutlich leichter als in der DFT, die Eigenschaften des Systems systematisch zu untersuchen und die zugrundeliegende Physik zu verstehen. Eines der bekanntesten Beispiele für den erfolgreichen Einsatz dieser Methode ist die Entwicklung der BCS-Theorie zur Beschreibung der konventionellen Supraleitung [95]. Die exakte Lösung des Problems gelingt allerdings auch mit dem idealisierten Modell-Hamilton-Operator nur in den wenigsten Fällen. Man ist also auch bei dieser Methode auf weitere Näherungen angewiesen, die selbstverständlich möglichst physikalisch begründbar sein sollten.

Natürlich sind die beiden Herangehensweisen nicht komplett unabhängig voneinander. Es wurden große Anstrengungen unternommen, um sie miteinander zu verbinden, da ihre Stärken und Schwächen sich ideal ergänzen. Wie bereits erwähnt, ist die DFT (in LDA-Näherung) nicht gut darin starke Wechselwirkungen zu beschreiben. Der Modellzugang andererseits kann keine realistischen Bandstrukturen liefern. Daher sind viele modernen Theorien zur Beschreibung von Realmaterialien so aufgebaut, dass sie die Bandstrukturen der DFT als Input zur Lösung des Modell-Hamilton-Operators verwenden [96, 97]. In der vorliegenden Arbeit wird die Methode der Modellbildung benutzt, um den Transport von Elektronen durch eine Tunnelstruktur zu beschreiben. Das Ziel besteht darin,

die mikroskopischen Ursachen von strominduziertem Schalten besser zu verstehen. Es ist nicht Zweck dieser Arbeit eine möglichst genaue Beschreibung realer Materialien zu liefern. Daher wird nur eine vereinfachte Bandstruktur verwendet. Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wird eines der bekanntesten Modelle der Vielteilchentheorie überhaupt, das Hubbard-Modell, vorgestellt. Anschließend wird ein Modell-Hamilton-Operator zur Beschreibung von Tunnelstrukturen vorgeschlagen. In den beiden darauffolgenden Abschnitten wird ausführlich beschrieben, wie es innerhalb dieses Modells gelingt, die Magnetisierung und den Tunnelstrom selbstkonsistent zu berechnen. Daraufhin werden verschiedene alternative Modelle, insbesondere im Hinblick auf ihre Wellenzahlabhängigkeiten, diskutiert. Das Kapitel endet mit der Beschreibung eines einfachen Zweibandhybridisierungsmodells.

## 3.1 Hubbard-Modell

Beim Hubbard-Modell handelt es sich um das, zumindest auf den ersten Blick, wohl einfachste Modell der Festkörperphysik, mit dem das Zusammenspiel von kinetischer Energie („Hopping“), Coulomb-Wechselwirkung, Pauli-Prinzip und Gitterstruktur untersucht werden kann [98, 99, 100]. Der Modell-Hamilton-Operator lautet

$$H = \sum_{ij\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \quad (3.1)$$

Dabei bezeichnet  $c_{i\sigma}$  ( $c_{i\sigma}^{\dagger}$ ) den Vernichtungs-(Erzeugungs-)operator eines Elektrons mit Spin  $\sigma$  am Gitterplatz  $\mathbf{R}_i$ .  $T_{ij}$  ist das Hoppingelement zwischen den Gitterplätzen  $\mathbf{R}_i$  und  $\mathbf{R}_j$ ,  $U$  ist die Coulomb-Wechselwirkungsstärke an einem Gitterplatz („on-site“) und  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$  ist der Besetzungszahloperator. Der erste Term entspricht der kinetischen Energie, die das System aufgrund des Hoppings der Elektronen zwischen verschiedenen Gitterplätzen besitzt. Der zweite Term beschreibt die Coulomb-Wechselwirkung.

Eine der wesentlichen Vereinfachungen des Hubbard-Modells besteht in der Annahme, dass nur Elektronen an demselben Gitterplatz miteinander wechselwirken können. Da die Reichweite der Coulomb-Wechselwirkung bekanntlich unendlich groß ist, ist diese Annahme natürlich sehr stark idealisierend. Allerdings ist sie in vielen Materialien in guter Näherung gerechtfertigt, da weiter entfernte Ladungen im Festkörper typischerweise stark abgeschirmt werden [101, 102]. Die Eigenschaften des Modells werden durch die Modellparameter Bandbesetzung  $n$ , Temperatur  $T$ , Gitterstruktur, Bandbreite  $W$  und Coulomb-Abstoßung  $U$  bestimmt. Insbesondere die effektive Coulomb-Korrelation  $U/W$  ist von Bedeutung. Das Hubbard-Modell eignet sich besonders gut zur Beschreibung von stark korrelierten Materialien mit schmalen Energiebändern, d.h. mit großem  $U$  und kleinem  $W$ , wie zum Beispiel die Bandferromagnete Fe, Co oder Ni. Trotz der recht einfachen Struktur des Modells ist bis heute keine allgemeine Lösung bekannt. Lediglich für bestimmte Grenzfälle sind exakte Aussagen möglich [103, 104].

Man ist bei der Verwendung des Modells also auf Näherungen angewiesen. Seit seiner Einführung 1963 wurde eine Vielzahl von Approximationen vorgeschlagen. An dieser



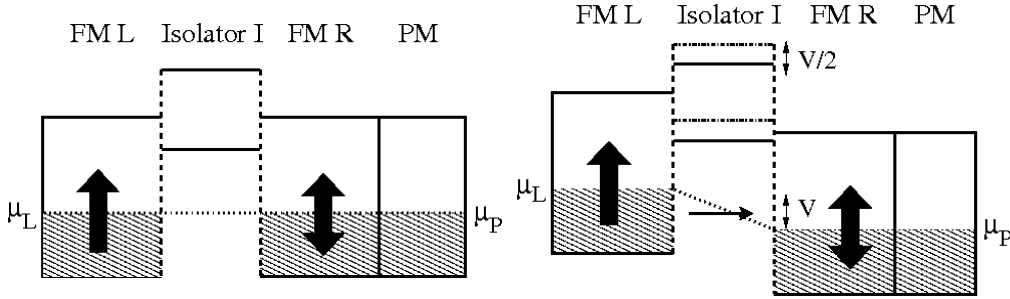


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung eines Tunnelkontakts ohne (links) und mit (rechts) angelegter Spannung  $V$ . Zwei Ferromagnete  $L$  und  $R$  sind durch einen Isolator  $I$  voneinander getrennt. An den rechten Ferromagneten schließt sich ein paramagnetisches Metall  $P$  an. Durch die Spannung werden die Bandschwerpunkte des rechten Ferromagneten und des Paramagneten um  $V$ , der des Isolators um  $\frac{V}{2}$  verschoben. Die dicken, schwarzen Pfeile symbolisieren die Magnetisierung, die im linken Ferromagnet immer nach oben zeigt, und im rechten variabel ist.

Stelle sollen nur einige der bekanntesten erwähnt werden. Im Bereich schwacher Kopplung hat sich die Mean Field-Version, das sogenannte Stoner-Modell, bewährt [101]. Für starke Kopplungen liefert ein Spektraldichteansatz (SDA) [105] glaubwürdige Ergebnisse, der in dieser Arbeit auf das Nichtgleichgewicht erweitert wird (vgl. Kapitel 4). Eine der meistdiskutierten Näherungen der letzten Jahre zur Lösung des Hubbard-Modells ist die dynamische Mean Field-Theorie (DMFT), die zwischen schwacher und starker Kopplung interpoliert und daher beide Grenzfälle erfüllt [106, 107].

## 3.2 Modell-Hamilton-Operator

Der Startpunkt der Modellbeschreibung ist die Wahl des Modell-Hamilton-Operators. Da das Ziel jeder Theorie letztlich darin besteht, Experimente zu beschreiben bzw. experimentelle Resultate vorherzusagen, ist es sehr von Vorteil, den Hamilton-Operator ausgehend von Systemen zu formulieren, die auch im Experiment verwendet werden. In Abb. 3.1 ist eine schematische Darstellung eines Tunnelkontakts gezeigt. Er besteht aus zwei Ferromagneten, die durch einen dünnen Isolator voneinander getrennt sind. Die Magnetisierung des linken Ferromagneten wird als fix angenommen, was experimentell dadurch realisiert wird, dass er im Vergleich zum rechten Ferromagneten sehr breit ist, also deutlich größeres Volumen besitzt [21, 108]. Die Magnetisierung des rechten Ferromagneten soll hingegen frei sein, d.h. er wird so dünn gewählt, dass seine Magnetisierung durch einen spinpolarisierten Strom beeinflusst werden kann. Alternativ dazu könnten auch zwei unterschiedliche Materialien mit verschiedenen Koerzitivfeldern benutzt werden [13]. Die endliche Dicke des rechten Ferromagneten wird im Modell dadurch simuliert, dass ein Paramagnet die Struktur nach rechts abschließt, der gleichzeitig als Elektronenreservoir dient. Dieser Paramagnet und der linke Ferromagnet werden als

### 3 Modellbeschreibung

halbunendlich angenommen. Die Aufteilung des Modell-Hamilton-Operators in folgende Teile bietet sich an:

$$H = H_L + H_{LI} + H_I + H_{RI} + H_R + H_{RP} + H_P \quad (3.2)$$

Die Regionen wurden dabei wie in Abb. 3.1 benannt, d.h.  $L$  steht für den linken Ferromagneten,  $I$  für den Isolator usw. Die Terme mit zwei Indizes beschreiben entsprechend die Kopplung zwischen den jeweiligen Regionen. Man beachte, dass nur benachbarte Schichten koppeln, insbesondere gibt es also keine direkte Kopplung zwischen den beiden Ferromagneten!

Damit ist die prinzipielle Struktur des Hamilton-Operators gegeben, nun müssen die einzelnen Terme aber noch mit Leben gefüllt werden. Im Experiment werden zur Konstruktion der Tunnelstrukturen üblicherweise Bandferromagnete verwendet. Daher werden in dieser Arbeit beide Ferromagnete formal identisch durch das Hubbard-Modell beschrieben, da dieses, wie bereits im letzten Abschnitt erwähnt, einen guten Ausgangspunkt zu ihrer Beschreibung darstellt. In Wannier-Darstellung gilt somit:

$$H_M = \sum_{i_M j_M \sigma} (T_{i_M j_M} - V_M \delta_{i_M j_M}) c_{i_M \sigma}^+ c_{j_M \sigma} + \frac{U_M}{2} \sum_{i_M \sigma} n_{i_M \sigma} n_{i_M - \sigma} \quad (M = L, R) \quad (3.3)$$

Im Gegensatz zum reinen Hubbard-Modell (3.1) bekommen alle Größen einen zusätzlichen Index  $M$ , der für den jeweiligen Ferromagneten steht. Dies verkompliziert die Notation, ist aber nötig, da unterschieden werden muss, in welchem Ferromagneten der jeweilige Gitterplatz liegt. Bei  $V_M$  handelt es sich um die Spannung, die am Ferromagneten  $M$  anliegt. Sie wird am Ende dieses Abschnitts näher diskutiert.

Der Isolator und der Paramagnet werden als wechselwirkungsfreie Festkörper aufgefasst, d.h. ihre Hamilton-Operatoren bestehen lediglich aus dem kinetischen Anteil und sind somit ebenfalls formal identisch:

$$H_X = \sum_{i_X j_X \sigma} (T_{i_X j_X} - V_X \delta_{i_X j_X}) d_{i_X \sigma}^+ d_{j_X \sigma} \quad (X = I, P) \quad (3.4)$$

Um die Unterscheidung zwischen wechselwirkenden und wechselwirkungsfreien Regionen zu vereinfachen, werden Konstruktionsoperatoren in ersteren mit  $c$  und in letzteren mit  $d$  bezeichnet.

Die verbleibenden Teile des Hamilton-Operators sind die Kopplungen. Diese werden durch eine Hybridisierung zwischen den beteiligten Regionen simuliert:

$$H_{MX} = \sum_{i_M j_X \sigma} \left( T_{i_M j_X} c_{i_M \sigma}^+ d_{j_X \sigma} + h.c. \right) \quad (3.5)$$

Der erste Term entspricht dem „Hopping“ eines Elektrons vom Gitterplatz  $\mathbf{R}_{j_X}$  in Region  $X$  zum Gitterplatz  $\mathbf{R}_{i_M}$  im Ferromagnet  $M$ . h.c. bezeichnet die hermitesche Konjugation. Daher beschreibt der zweite Term genau den umgekehrten Hüpfprozess. Diese Art der Modellierung des Transportprozesses über einen Hybridisierungsterm wurde erst-

mals von Caroli *et al.* [109, 110, 111] in einer Reihe von Veröffentlichungen entwickelt und später von Meir, Wingreen und Jauho [112, 113] in der hier dargestellten Form verwendet.

Im Weiteren wird es sich gelegentlich als nützlich erweisen, den Hamilton-Operator (3.2) in Bloch- anstatt Wannier-Darstellung zu verwenden. Der Übergang zwischen den beiden Darstellungen kann durch Fouriertransformation vollzogen werden. Die Operatoren transformieren sich dabei folgendermaßen:

$$c_{i_M\sigma}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}_M} e^{(-)i\mathbf{k}_M \cdot \mathbf{R}_{i_M}} c_{\mathbf{k}_M\sigma}^{(+)} \quad (3.6)$$

Eine analoge Beziehung gilt für die  $d_{i_X\sigma}^{(+)}$ . Die Hoppingparameter gehen über in die Dispersionen  $\epsilon_{\mathbf{k}_A}$  bzw. Tunnelkopplungen  $\epsilon_{\mathbf{k}_A\mathbf{k}_B}$ :

$$T_{i_A j_A} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_A} e^{i\mathbf{k}_A \cdot (\mathbf{R}_{i_A} - \mathbf{R}_{j_A})} \epsilon_{\mathbf{k}_A} \quad (3.7)$$

$$T_{i_A j_B} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_A \mathbf{k}_B} e^{i(\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{R}_{i_A} - \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{R}_{j_B})} \epsilon_{\mathbf{k}_A \mathbf{k}_B} \quad (3.8)$$

Dabei stehen  $A$  und  $B$  jeweils für  $L, I, R$  oder  $P$ . Als Dispersion wird in dieser Arbeit die Tight Binding-Dispersion des dreidimensionalen kubisch raumzentrierten (bcc) Gitters verwendet. Diese lautet [114, 115]:

$$\epsilon_{\mathbf{k}_A} = T_{0,A} - 8t_A \cos\left(\frac{k_{A,x}}{2}\right) \cos\left(\frac{k_{A,y}}{2}\right) \cos\left(\frac{k_{A,z}}{2}\right) \quad (3.9)$$

$T_{0,A}$  ist der Bandschwerpunkt und  $t_A$  ist das Hoppingelement zwischen benachbarten Gitterplätzen. Dieses wird oft über die Bandbreite  $W_A$  ausgedrückt. Für das bcc-Gitter gilt dabei die Beziehung  $W_A = 16|t_A|$ .

Die Tunnelkopplungen  $\epsilon_{\mathbf{k}_A\mathbf{k}_B}$  können im Rahmen dieses Modells nicht selbstkonsistent bestimmt werden. Im Prinzip müssten sie mit Hilfe von *ab initio*-Methoden wie der DFT berechnet werden. Für die numerische Auswertung der vorliegenden Theorie in Kapitel 5 werden sie jedoch als vorzugebende Parameter behandelt. Weiterhin wird bei der Auswertung angenommen, dass sie wellenzahlunabhängig und reell sind, d.h.  $\epsilon_{\mathbf{k}_A\mathbf{k}_B} \equiv \epsilon_{AB} \equiv \epsilon_{BA}$ . Das hat insbesondere zur Folge, dass die Wellenzahl bei Übergängen zwischen verschiedenen Schichten nicht notwendigerweise erhalten bleibt. Alternative Modellierungsvorschläge (samt ihren Vor- und Nachteilen) für die Wahl der Tunnelkopplung  $\epsilon_{\mathbf{k}_A\mathbf{k}_B}$  werden in Abschnitt 3.5 diskutiert.

Nach Fouriertransformation von Orts- in Wellenzahldarstellung erhält man für die ein-

### 3 Modellbeschreibung

zelenen Terme des Hamilton-Operators:

$$H_M = \sum_{\mathbf{k}_M \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}_M} - V_M) c_{\mathbf{k}_M \sigma}^+ c_{\mathbf{k}_M \sigma} + \frac{U_M}{2N} \sum_{\mathbf{k}_M \mathbf{p}_M \mathbf{q}_M \sigma} c_{\mathbf{k}_M + \mathbf{q}_M \sigma}^+ c_{\mathbf{p}_M - \mathbf{q}_M - \sigma}^+ c_{\mathbf{p}_M - \sigma} c_{\mathbf{k}_M \sigma} \quad (3.10)$$

$$H_X = \sum_{\mathbf{k}_X \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}_X} - V_X) d_{\mathbf{k}_X \sigma}^+ d_{\mathbf{k}_X \sigma} \quad (3.11)$$

$$H_{MX} = \sum_{\mathbf{k}_M \mathbf{k}_X \sigma} \left( \epsilon_{\mathbf{k}_M \mathbf{k}_X} c_{\mathbf{k}_M \sigma}^+ d_{\mathbf{k}_X \sigma} + h.c. \right) \quad (3.12)$$

wobei wiederum die Abkürzungen  $M = R, L$  und  $X = I, P$  verwendet wurden.

Um die Modellbeschreibung zu vervollständigen, muss noch spezifiziert werden, wie die einzelnen Spannungen  $V_M$  bzw.  $V_X$  mit der realen angelegten Spannung  $V$  zusammenhängen. Es wird angenommen, dass sich die Spannung wie in Abb. 3.1 dargestellt auswirkt, d.h. sie soll den Bandschwerpunkt des rechten Ferromagneten und des Paramagneten um jeweils  $V$  verschieben und den Bandschwerpunkt des Isolators um  $\frac{V}{2}$ . Der Bandschwerpunkt des linken Ferromagneten definiert den energetischen Nullpunkt und soll daher nicht von der Spannung beeinflusst werden. Somit werden die einzelnen Spannungen wie folgt gewählt:

$$V_L = 0 \quad (3.13)$$

$$V_I = \frac{V}{2} \quad (3.14)$$

$$V_R = V_P = V \quad (3.15)$$

Die Spannung wird dabei so definiert, dass ein positives  $V$  die rechten Bandschwerpunkte relativ zu dem linken Bandschwerpunkt nach unten, d.h. zu niedrigeren Energien, schiebt. Negative Spannungen schieben die rechten Bänder entsprechend zu höheren Energien. Mit der Festlegung der Spannungsabhängigkeit ist das Modell vollständig vorgegeben und in den nächsten Abschnitten kann damit begonnen werden, die aus experimenteller Sicht interessanten Größen, wie z.B. die Magnetisierung oder den Tunnelstrom, analytisch zu berechnen.

### 3.3 Selbstkonsistente Berechnung der Magnetisierung

Die zentrale Größe bei der Diskussion von strominduziertem Schalten ist offensichtlich die Magnetisierung des freien (rechten) Ferromagneten. Sie ist definiert als die Differenz der mittleren Besetzungszahlen von Spin Up- und Down-Elektronen:

$$m_R = \langle n_{R,\uparrow} \rangle - \langle n_{R,\downarrow} \rangle \quad (3.16)$$

### 3.3 Selbstkonsistente Berechnung der Magnetisierung

Die spitzen Klammern bezeichnen wie üblich den thermodynamischen Mittelungsprozess. Die Magnetisierung ist offenbar genau dann bestimmt, wenn es gelingt die mittleren Besetzungszahlen  $\langle n_{R,\sigma} \rangle$  für beide Spinrichtungen  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  im Rahmen des im letzten Abschnitt vorgestellten Modells zu berechnen.

Der enge Zusammenhang zwischen mittlerer Elektronenbesetzungszahl und kleinerer Greenfunktion  $G_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(t, t') = i\langle c_{\mathbf{k}_R\sigma}^+(t')c_{\mathbf{k}_R\sigma}(t) \rangle$  wurde bereits in Abschnitt 2.4 diskutiert. Es gilt die folgende Beziehung für die spinabhängige Besetzungszahl im rechten Ferromagneten:

$$\langle n_{R,\sigma} \rangle = \frac{1}{2\pi i N} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE G_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E), \quad (3.17)$$

wobei  $G_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E)$  die Fouriertransformierte von  $G_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(t, t')$  bezeichnet. Damit wurde das Problem auf die Berechnung der kleineren Greenfunktion verlagert. Die weitere Vorgehensweise besteht nun darin, zunächst die allgemeine NEGF zu berechnen und dann die analytischen Fortsetzungsregeln aus Abschnitt 2.2 anzuwenden, um ihre kleinere Komponente zu erhalten, mit der dann die Besetzungszahlen, und somit die Magnetisierung, berechnet werden können.

#### 3.3.1 Berechnung der NEGF des rechten Ferromagneten

Alle interessierenden Größen können aus der wellenzahlabhängigen Einteilchengreenfunktion des rechten Ferromagneten

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}(E) = \langle\langle c_{\mathbf{k}_R\sigma}; c_{\mathbf{k}_R\sigma}^+ \rangle\rangle_E \quad (3.18)$$

abgeleitet werden. Ausgangspunkt der weiteren Berechnung ist die allgemeine Bewegungsgleichung einer (energieabhängigen) Greenfunktion [71]<sup>1</sup>:

$$E\langle\langle A; B \rangle\rangle_E = \langle[A, B]_+\rangle + \langle\langle[A, H]_-; B\rangle\rangle_E, \quad (3.19)$$

die in diesem Fall also lautet:

$$EG_{\mathbf{k}_R\sigma}(E) = 1 + \langle\langle[c_{\mathbf{k}_R\sigma}, H]_-; c_{\mathbf{k}_R\sigma}^+\rangle\rangle_E \quad (3.20)$$

Der Kommutator auf der rechten Seite muss mit dem vollen Hamilton-Operator (3.2) berechnet werden. In Anhang 6 sind die Ergebnisse aller Kommutatoren und Antikommutatoren, die für die weitere Berechnung benötigt werden, angegeben. Mit Gl. (14) folgt:

$$(E - \epsilon_{\mathbf{k}_R}) G_{\mathbf{k}_R\sigma}(E) = 1 + \langle\langle[c_{\mathbf{k}_R\sigma}, H_{int}^R]_-; c_{\mathbf{k}_R\sigma}^+\rangle\rangle_E + \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_X} G_{\mathbf{k}_X\mathbf{k}_R\sigma}(E) \quad (3.21)$$

Dabei steht  $H_{int}^R$  für den Hubbard-Anteil im Hamilton-Operator (3.10) des rechten Ferromagneten. Es ist zwar im Prinzip möglich den Kommutator mit diesem Wechselwirkungsanteil zu berechnen. Allerdings führt dies auf höhere Greenfunktionen, deren Be-

<sup>1</sup>In der gesamten Arbeit wird  $\hbar = 1$  gesetzt.

### 3 Modellbeschreibung

wegungsgleichungen noch höhere Greenfunktionen enthalten würden und so fort. Daher besteht ein Standardlösungsverfahren der Vielteilchentheorie darin, eine Selbstenergie durch folgende Gleichung zu postulieren:

$$\langle\langle [c_{\mathbf{k}_R\sigma}, H_{int}^R]_-; c_{\mathbf{k}_R\sigma}^+ \rangle\rangle_E \equiv \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}(E) G_{\mathbf{k}_R\sigma}(E) \quad (3.22)$$

Natürlich stellt dieses Postulat an sich noch keine Lösung dar; das Problem wurde lediglich auf die noch zu bestimmende Selbstenergie  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}(E)$  verschoben. Im nächsten Kapitel wird sie näherungsweise im Rahmen eines Nichtgleichgewichtsspektraldichteansatzes (NSDA) bestimmt. Für die weitere Herleitung der Magnetisierung wird allerdings zunächst noch kein konkreter Ausdruck für die Selbstenergie benötigt.

Weiterhin wurden in der obigen Bewegungsgleichung noch die gemischten Greenfunktionen

$$G_{\mathbf{k}_X\mathbf{k}_R\sigma}(E) = \langle\langle d_{\mathbf{k}_X\sigma}; c_{\mathbf{k}_R\sigma}^+ \rangle\rangle_E \quad (X = I, P) \quad (3.23)$$

definiert, die eine Konsequenz aus der Hybridisierung mit den beiden benachbarten Regionen  $I$  und  $P$  sind. Für diese müssen ebenfalls die Bewegungsgleichungen aufgestellt werden. Zunächst wird der einfachere Fall  $X = P$  betrachtet. Die Bewegungsgleichung lautet<sup>2</sup>:

$$\begin{aligned} E G_{\mathbf{k}_P\mathbf{k}_R\sigma} &= 0 + \langle\langle [d_{\mathbf{k}_P\sigma}, H]_-; c_{\mathbf{k}_R\sigma}^+ \rangle\rangle_E \\ &= \epsilon_{\mathbf{k}_P} G_{\mathbf{k}_P\mathbf{k}_R\sigma} + \sum_{\mathbf{q}_R} \epsilon_{\mathbf{k}_P\mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R\mathbf{k}_R\sigma}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

wobei im zweiten Schritt die Relation (.15) verwendet wurde. Auf der rechten Seite taucht nun wieder die Greenfunktion des rechten Ferromagneten auf, allerdings mit unterschiedlichen Wellenzahlen. Die Gleichung kann noch etwas kompakter geschrieben werden, indem man die freie Greenfunktion des Paramagneten

$$g_{\mathbf{k}_P\sigma} = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_P}} \quad (3.25)$$

benutzt. Da es sich um einen Paramagneten handelt, ist sie natürlich nicht spinabhängig. Der Spinindex  $\sigma$  ist also rein formaler Natur. Damit ist die erste der beiden gemischten Greenfunktionen bestimmt:

$$G_{\mathbf{k}_P\mathbf{k}_R\sigma} = \sum_{\mathbf{q}_R} g_{\mathbf{k}_P\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}_P\mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R\mathbf{k}_R\sigma} \quad (3.26)$$

---

<sup>2</sup>Um die Notation möglichst übersichtlich zu gestalten, werden von nun an die Energieargumente nicht mehr angegeben, sofern keine Missverständnisse auftreten können.

### 3.3 Selbstkonsistente Berechnung der Magnetisierung

Nun muss noch die Bewegungsgleichung für den Fall  $X = I$  aufgestellt werden. Mit Hilfe der Kommutatorrelation (.16) erhält man:

$$\begin{aligned} EG_{\mathbf{k}_I\mathbf{k}_R\sigma} &= 0 + \langle\langle [d_{\mathbf{k}_I\sigma}, H]_-; c_{\mathbf{k}_R\sigma}^+ \rangle\rangle_E \\ &= \epsilon_{\mathbf{k}_I} G_{\mathbf{k}_I\mathbf{k}_R\sigma} + \sum_{\mathbf{k}_L} \epsilon_{\mathbf{k}_I\mathbf{k}_L} G_{\mathbf{k}_L\mathbf{k}_R\sigma} + \sum_{\mathbf{q}_R} \epsilon_{\mathbf{k}_I\mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R\mathbf{k}_R\sigma} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Allerdings ist in diesem Fall die Lösung nicht ganz so einfach, da aufgrund der Kopplung zwischen Isolator und linkem Ferromagnet eine weitere gemischte Greenfunktion  $G_{\mathbf{k}_L\mathbf{k}_R\sigma} = \langle\langle c_{\mathbf{k}_L\sigma}; c_{\mathbf{k}_R\sigma}^+ \rangle\rangle$  auf der rechten Seite der Gleichung auftaucht. Für ihre Bewegungsgleichung folgt mit dem Kommutator (.17):

$$\begin{aligned} EG_{\mathbf{k}_L\mathbf{k}_R\sigma} &= 0 + \langle\langle [c_{\mathbf{k}_L\sigma}, H]_-; c_{\mathbf{k}_R\sigma}^+ \rangle\rangle \\ &= \epsilon_{\mathbf{k}_L} G_{\mathbf{k}_L\mathbf{k}_R\sigma} + \langle\langle [c_{\mathbf{k}_L\sigma}, H_{int}^L]_-; c_{\mathbf{k}_R\sigma}^+ \rangle\rangle_E + \\ &\quad + \sum_{\mathbf{q}_I} \epsilon_{\mathbf{k}_L\mathbf{q}_I} G_{\mathbf{q}_I\mathbf{k}_R\sigma} \end{aligned} \quad (3.28)$$

$H_{int}^L$  ist wiederum der Hubbard-Anteil des Hamilton-Operators, dieses Mal allerdings im linken Metall. Man postuliert analog zu Gl. (3.22):

$$\langle\langle [c_{\mathbf{k}_L\sigma}, H_{int}^L]_-; c_{\mathbf{k}_R\sigma}^+ \rangle\rangle_E \equiv \Sigma_{\mathbf{k}_L\sigma}(E) G_{\mathbf{k}_L\mathbf{k}_R\sigma}(E) \quad (3.29)$$

Damit lautet die Bewegungsgleichung:

$$(E - \epsilon_{\mathbf{k}_L} - \Sigma_{\mathbf{k}_L\sigma}) G_{\mathbf{k}_L\mathbf{k}_R\sigma} = \sum_{\mathbf{q}_I} \epsilon_{\mathbf{k}_L\mathbf{q}_I} G_{\mathbf{q}_I\mathbf{k}_R\sigma} \quad (3.30)$$

Auch hier lässt sich die Gleichung vereinfachen, indem man die Größe in der linken Klammer mit der inversen Greenfunktion des linken Ferromagneten identifiziert:

$$g_{\mathbf{k}_L\sigma} = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_L} - \Sigma_{\mathbf{k}_L\sigma}} \quad (3.31)$$

Im Gegensatz zur freien Greenfunktion des Paramagneten ist  $g_{\mathbf{k}_L\sigma}$  tatsächlich über die Selbstenergie spinabhängig. Dies ist natürlich nicht überraschend, da sie einen Ferromagneten beschreibt. Da angenommen wird, dass die linke Magnetisierung fixiert ist, kann sie nicht durch den Strom beeinflusst werden. Der linke Ferromagnet bleibt also durchgehend im thermodynamischen Gleichgewicht. Daher wurde zur Bezeichnung der Greenfunktion ein kleines  $g$  verwendet, was darauf hindeuten soll, dass es sich um eine Gleichgewichtsgröße handelt.

Somit ist es gelungen, die gemischte Greenfunktion zwischen den beiden Ferromagneten auf die Greenfunktion zwischen Isolator und rechtem Ferromagneten zurückzuführen:

$$G_{\mathbf{k}_L\mathbf{k}_R\sigma} = \sum_{\mathbf{q}_I} g_{\mathbf{k}_L\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}_L\mathbf{q}_I} G_{\mathbf{q}_I\mathbf{k}_R\sigma} \quad (3.32)$$

### 3 Modellbeschreibung

Diese Funktion kann nun in die Bewegungsgleichung der eigentlich interessierenden gemischten Greenfunktion (3.27) eingesetzt werden:

$$(E - \epsilon_{\mathbf{k}_I}) G_{\mathbf{k}_I \mathbf{k}_R \sigma} = \sum_{\mathbf{k}_L \mathbf{q}_I} \epsilon_{\mathbf{k}_I \mathbf{k}_L} g_{\mathbf{k}_L \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}_L \mathbf{q}_I} G_{\mathbf{q}_I \mathbf{k}_R \sigma} + \sum_{\mathbf{q}_R} \epsilon_{\mathbf{k}_I \mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} \quad (3.33)$$

An dieser Stelle bietet sich zur Vereinfachung der Notation die Definition der sogenannten Tunnelselbstenergie an:

$$\Delta_{\mathbf{k}_I \mathbf{q}_I \sigma}^{(L)} \equiv \sum_{\mathbf{k}_L} \epsilon_{\mathbf{k}_I \mathbf{k}_L} g_{\mathbf{k}_L \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}_L \mathbf{q}_I} \quad (3.34)$$

Physikalisch beschreibt sie die Bewegung eines Teilchens, das mit der Wellenzahl  $\mathbf{q}_I$  im Isolator startet und in einen Zustand mit Wellenzahl  $\mathbf{k}_L$  im linken Ferromagneten springt ( $\epsilon_{\mathbf{k}_L \mathbf{q}_I}$ ). Die Propagation des Elektrons durch den Ferromagneten wird durch die Gleichgewichtsgreenfunktion  $g_{\mathbf{k}_L \sigma}$  beschrieben. Anschließend springt das Teilchen wieder in den Isolator zurück, wobei es aber nicht notwendigerweise in einen Zustand mit der ursprünglichen Wellenzahl  $\mathbf{q}_I$  hüpfen muss ( $\epsilon_{\mathbf{k}_I \mathbf{k}_L}$ ). Es erweist sich allerdings, dass genau diese Nichterhaltung der Wellenzahl beim Zurückspringen zu Problemen analytischer Art führt, da die Bewegungsgleichungen nicht mehr geschlossen werden können. Daher wird im Weiteren die Näherung

$$\Delta_{\mathbf{k}_I \mathbf{q}_I \sigma}^{(L)} = \Delta_{\mathbf{k}_I \sigma}^{(L)} \delta_{\mathbf{k}_I \mathbf{q}_I} \quad (3.35)$$

verwendet, d.h. es wird angenommen, dass ein Elektron nach dem Zurücktunneln wieder in einen Zustand mit demselben Wellenvektor übergeht. Welche Konsequenzen sich aus dieser Annahme ergeben, wird am Ende dieses Abschnitts und in Abschnitt 3.5 näher diskutiert.

Unter Verwendung der Annahme lässt sich die Bewegungsgleichung zusammenfassen:

$$(E - \epsilon_{\mathbf{k}_I} - \Delta_{\mathbf{k}_I \sigma}^{(L)}) G_{\mathbf{k}_I \mathbf{k}_R \sigma} = \sum_{\mathbf{q}_R} \epsilon_{\mathbf{k}_I \mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} \quad (3.36)$$

Auch an dieser Stelle bietet sich die Definition einer neuen Greenfunktion an:

$$G_{\mathbf{k}_I \sigma}^{(L)} \equiv \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_I} - \Delta_{\mathbf{k}_I \sigma}^{(L)}} \quad (3.37)$$

Im Gegensatz zu den vorhergehenden Fällen beinhaltet sie nun allerdings die Tunnelselbstenergie, d.h. es handelt sich nicht mehr um eine Gleichgewichtsgreenfunktion. Dies muss bei ihrer weiteren Auswertung berücksichtigt werden. Multipliziert man Gl. (3.36) mit dieser neu eingeführten Greenfunktion, ergibt sich ein zum Fall  $X = P$  (s. Gl. (3.26)) analoger Ausdruck für die gemischte Greenfunktion:

$$G_{\mathbf{k}_I \mathbf{k}_R \sigma} = \sum_{\mathbf{q}_R} G_{\mathbf{k}_I \sigma}^{(L)} \epsilon_{\mathbf{k}_I \mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} \quad (3.38)$$

Es ist also gelungen beide gemischte Greenfunktionen (3.23) auf die Greenfunktion des rechten Ferromagneten zurückzuführen. Setzt man beide Ergebnisse (3.26) und (3.38)



### 3.3 Selbstkonsistente Berechnung der Magnetisierung

samt des Postulats der Selbstenergie (3.22) in die ursprüngliche Bewegungsgleichung (3.21) ein, so ergibt sich:

$$(E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}) G_{\mathbf{k}_R\sigma} = 1 + \sum_{\mathbf{q}_R} \left( \sum_{\mathbf{k}_I} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_I} G_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(L)} \epsilon_{\mathbf{k}_I\mathbf{q}_R} + \sum_{\mathbf{k}_P} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_P} g_{\mathbf{k}_P\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}_P\mathbf{q}_R} \right) G_{\mathbf{q}_R\mathbf{k}_R\sigma} \quad (3.39)$$

Die beiden Terme in der Klammer auf der rechten Seite können wieder mit Tunnelselbstenergien identifiziert werden. Diese enthalten den kompletten Einfluss der Hybridisierung zwischen dem rechten Ferromagneten und den angrenzenden Schichten:

$$\Delta_{\mathbf{k}_R\mathbf{q}_R\sigma}^{(I)} \equiv \sum_{\mathbf{k}_I} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_I} G_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(L)} \epsilon_{\mathbf{k}_I\mathbf{q}_R} \quad (3.40)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}_R\mathbf{q}_R\sigma}^{(P)} \equiv \sum_{\mathbf{k}_P} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_P} g_{\mathbf{k}_P\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}_P\mathbf{q}_R} \quad (3.41)$$

Auch hier tritt wieder das Problem der Nichtdiagonalität der Tunnelselbstenergie im Wellenzahlraum auf, das sich analog zu oben durch die zusätzliche Annahme

$$\Delta_{\mathbf{k}_R\mathbf{q}_R\sigma}^{(X)} = \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(X)} \delta_{\mathbf{k}_R\mathbf{q}_R} \quad (X = I, P) \quad (3.42)$$

umgehen lässt. Fasst man beide Tunnelselbstenergien noch zu einer Gesamttunnelselbstenergie

$$\Delta_{\mathbf{k}_R\sigma} \equiv \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(I)} + \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(P)} \quad (3.43)$$

zusammen, lässt sich die Greenfunktion des rechten Ferromagneten kompakt schreiben als

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}(E) = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}(E) - \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}(E)} \quad (3.44)$$

Um die Konsequenzen der beiden Annahmen (3.35) und (3.42) deutlicher herauszustellen, kann dieser Ausdruck für die Greenfunktion noch etwas umgeformt werden. Dazu definiert man zunächst die Greenfunktion des rechten Ferromagneten ohne Tunnelselbstenergie:

$$F_{\mathbf{k}_R\sigma} = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}} \quad (3.45)$$

Formal sieht sie identisch aus zur linken Gleichgewichtsgreenfunktion (3.31). Sie ist allerdings im Nichtgleichgewicht zu berechnen, da der rechte Ferromagnet durch den Strom beeinflusst werden kann. Mit ihrer Hilfe kann die volle Greenfunktion in die Form einer Dyson-Gleichung gebracht werden:

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma} = F_{\mathbf{k}_R\sigma} + F_{\mathbf{k}_R\sigma} \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma} G_{\mathbf{k}_R\sigma} \quad (3.46)$$

### 3 Modellbeschreibung

Durch einmalige Iteration dieser Gleichung ergibt sich:

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma} = F_{\mathbf{k}_R\sigma} + F_{\mathbf{k}_R\sigma} \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma} F_{\mathbf{k}_R\sigma} + F_{\mathbf{k}_R\sigma} \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma} F_{\mathbf{k}_R\sigma} \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma} G_{\mathbf{k}_R\sigma} \quad (3.47)$$

Man kann zeigen (vgl. Abschnitt 3.5), dass ohne die Annahme der Wellenzahlerhaltung beim Zurücktunneln folgender Ausdruck für die Greenfunktion gelten würde:

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}_R\sigma} &= F_{\mathbf{k}_R\sigma} + F_{\mathbf{k}_R\sigma} \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma} F_{\mathbf{k}_R\sigma} + \sum_{\mathbf{q}_R \mathbf{p}_R} F_{\mathbf{k}_R\sigma} \Delta_{\mathbf{k}_R \mathbf{q}_R\sigma} F_{\mathbf{q}_R\sigma} \Delta_{\mathbf{q}_R \mathbf{p}_R\sigma} G_{\mathbf{p}_R \mathbf{k}_R\sigma} \\ &= F_{\mathbf{k}_R\sigma} + F_{\mathbf{k}_R\sigma} \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma} F_{\mathbf{k}_R\sigma} + F_{\mathbf{k}_R\sigma} \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma} F_{\mathbf{k}_R\sigma} \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma} G_{\mathbf{k}_R\sigma} + \\ &\quad + \sum_{\substack{\mathbf{q}_R, \mathbf{p}_R \neq \mathbf{k}_R \\ \mathbf{q}_R \mathbf{p}_R}} F_{\mathbf{k}_R\sigma} \Delta_{\mathbf{k}_R \mathbf{q}_R\sigma} F_{\mathbf{q}_R\sigma} \Delta_{\mathbf{q}_R \mathbf{p}_R\sigma} G_{\mathbf{p}_R \mathbf{k}_R\sigma} \end{aligned} \quad (3.48)$$

Offenbar stimmen die ersten drei Terme in beiden Gleichungen überein. Der vierte Term wird durch Übergänge in Zustände mit Wellenzahl  $\mathbf{q}_R \neq \mathbf{k}_R$  bzw.  $\mathbf{p}_R \neq \mathbf{k}_R$  verursacht und fehlt daher in der Näherung. Da die Tunnelselbstenergien quadratisch von den Tunnelkopplungen  $\epsilon_{\mathbf{k}_M \mathbf{k}_X}$  abhängen, ergeben sich also erst bei Termen der Ordnung  $\epsilon_{\mathbf{k}_M \mathbf{k}_X}^4$  Differenzen zwischen den beiden Ausdrücken. Solange  $\epsilon_{\mathbf{k}_M \mathbf{k}_X}$  deutlich kleiner als Eins bleibt, werden beide Versionen somit dasselbe Ergebnis liefern. Für eine weitergehende Diskussion dieser Thematik sei auf Abschnitt 3.5 verwiesen.

In diesem Abschnitt wurde der Ausdruck (3.44) für die NEGF hergeleitet. Zur Berechnung der Magnetisierung wird hingegen die kleinere Greenfunktion benötigt. Diese kann, wie bereits erwähnt, durch analytische Fortsetzung aus der NEGF bestimmt werden. Dies ist Inhalt des nächsten Abschnitts.

#### 3.3.2 Berechnung der kleineren Greenfunktionen des rechten Ferromagneten

Die einfachste Art die kleinere Greenfunktion zu bestimmen besteht darin, die NEGF zunächst in Form einer Dyson-Gleichung zu schreiben. Dies wurde zwar bereits im letzten Abschnitt erreicht (s. Gl. (3.46)), allerdings ist diese Gleichung für die weitere Auswertung insofern problematisch, als die Greenfunktion (3.45) im Nichtgleichgewicht zu berechnen ist. Unter Benutzung der „echten“ freien Greenfunktion des rechten Ferromagneten

$$g_{\mathbf{k}_R\sigma} = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_R}}, \quad (3.49)$$

lässt sich die volle Greenfunktion (3.44) auch durch folgende Dyson-Gleichung darstellen:

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma} = g_{\mathbf{k}_R\sigma} + g_{\mathbf{k}_R\sigma} (\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma} + \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}) G_{\mathbf{k}_R\sigma} \quad (3.50)$$

Diese Version hat den Vorteil, dass  $g_{\mathbf{k}_R\sigma}$  eine reine Gleichgewichtsgröße ist und der Einfluss des Nichtgleichgewichts vollständig in den beiden Selbstenergien enthalten ist. Es ist nun problemlos möglich, die retardierte Greenfunktion durch analytische Fortsetzung

### 3.3 Selbstkonsistente Berechnung der Magnetisierung

aus dieser Gleichung zu erhalten:

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r = g_{\mathbf{k}_R\sigma}^r + g_{\mathbf{k}_R\sigma}^r \left( \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r + \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^r \right) G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r \quad (3.51)$$

Aufgelöst ergibt sich ein zur NEGF analoger Ausdruck:

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r - \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^r} \quad (3.52)$$

Die avancierte Greenfunktion  $G_{\mathbf{k}_R\sigma}^a = \left( G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r \right)^*$  ist somit ebenfalls bestimmt. Zur endgültigen Lösung des Problems fehlt nur noch die kleinere Greenfunktion, deren Berechnung sich allerdings ein wenig aufwändiger gestaltet. Die zur Dyson-Gleichung (3.50) gehörige Keldysh-Gleichung lautet (vgl. Abschnitt 2.3):

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}^< = G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r \left( \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^< + \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^< \right) G_{\mathbf{k}_R\sigma}^a \quad (3.53)$$

Dabei wurde bereits ausgenutzt, dass die Greenfunktion  $g_{\mathbf{k}_R\sigma}$  keine Selbstenergie enthält und der erste Term der allgemeinen Keldysh-Gleichung (2.54) somit verschwindet. Das Problem besteht nun in der Berechnung der beiden kleineren Tunnelselbstenergien

$$\Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^< = \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(I),<} + \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(P),<} \quad (3.54)$$

und der kleineren Wechselwirkungsselbstenergie  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^<$ . Die (näherungsweise) Berechnung der Wechselwirkungsselbstenergie und ihrer kleineren Komponente wird Inhalt des nächsten Kapitels sein. Für die weitere Berechnung in diesem Abschnitt wird sie als bekannt vorausgesetzt.

Die paramagnetische kleinere Tunnelselbstenergie ist leicht zu berechnen, da sie im Wesentlichen nur aus einer freien Gleichgewichtsgreenfunktion besteht:

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(P),<}(E) &\stackrel{(3.41)}{=} \sum_{\mathbf{k}_P} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_P} g_{\mathbf{k}_P\sigma}^<(E) \epsilon_{\mathbf{k}_P\mathbf{q}_R} \\ &\stackrel{(2.61)}{=} -2i f_P(E) \sum_{\mathbf{k}_P} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_P} \text{Im} g_{\mathbf{k}_P\sigma}^r(E) \epsilon_{\mathbf{k}_P\mathbf{k}_R} \\ &= -2i f_P(E) \text{Im} \left( \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(P),r} \right) \end{aligned} \quad (3.55)$$

Dabei ist  $f_P(E) = (e^{\beta(E-\mu_P)} + 1)^{-1}$  die Fermifunktion im Paramagneten, die durch das chemische Potential  $\mu_P$  charakterisiert ist. Für die retardierte Greenfunktion im Paramagneten gilt (vgl. Gl. (3.25)):

$$g_{\mathbf{k}_P\sigma}^r(E) = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_P} + i0^+} \quad (3.56)$$

Da die Isolator-tunnelselbstenergie nicht aus einer einfachen Gleichgewichtsgreenfunktion besteht, ist ihre Berechnung etwas komplizierter. Zunächst wird erneut die Keldysh-

### 3 Modellbeschreibung

Gleichung verwendet, dieses Mal allerdings für die Isolatorgreenfunktion:

$$\begin{aligned}\Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(I),<}(E) &\stackrel{(3.40)}{=} \sum_{\mathbf{k}_I} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_I} G_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(L),<}(E) \epsilon_{\mathbf{k}_I\mathbf{k}_R} \\ &= \sum_{\mathbf{k}_I} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_I} G_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(L),r}(E) \Delta_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(L),<}(E) G_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(L),a}(E) \epsilon_{\mathbf{k}_I\mathbf{k}_R}\end{aligned}\quad (3.57)$$

Die kleinere linke Tunnelselbstenergie  $\Delta_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(L),<}$  lässt sich wiederum einfach berechnen, da sie nur aus einer Gleichgewichtsgreenfunktion besteht. Analog zu Gl. (3.55) gilt:

$$\begin{aligned}\Delta_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(L),<}(E) &\stackrel{(3.34)}{=} \sum_{\mathbf{k}_L} \epsilon_{\mathbf{k}_I\mathbf{k}_L} g_{\mathbf{k}_L\sigma}^{<}(E) \epsilon_{\mathbf{k}_L\mathbf{k}_I} \\ &= -2i f_L(E) \text{Im} \left( \Delta_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(L),r} \right)\end{aligned}\quad (3.58)$$

$f_L(E)$  ist die Fermifunktion im linken Ferromagnet und die retardierte Greenfunktion lautet (vgl. Gl. (3.31))

$$g_{\mathbf{k}_L\sigma}^r = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_L} - \Sigma_{\mathbf{k}_L\sigma}^r} \quad (3.59)$$

Auch die linke Wechselwirkungsselbstenergie  $\Sigma_{\mathbf{k}_L\sigma}^r$  soll, genau wie die rechte, an dieser Stelle als bekannt vorausgesetzt werden. Damit ist die kleinere Tunnelselbstenergie (3.54) und somit auch die kleinere Greenfunktion (3.53) des rechten Ferromagneten vollständig bestimmt. Über die Beziehungen (3.17) und (3.16) lässt sich daraus die Magnetisierung des rechten Ferromagneten berechnen. Das Problem kann damit als gelöst gelten, sofern es gelingt die beiden Wechselwirkungsselbstenergien  $\Sigma_{\mathbf{k}_L\sigma}$  und  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}$  zu berechnen. Man beachte, dass das chemische Potential  $\mu_R$  des rechten Ferromagneten an keiner Stelle in der Theorie verwendet wird. Die Teilchenzahl  $\langle n_{R,\sigma} \rangle$  wird allein durch die chemischen Potentiale der Kontakte  $\mu_L$  und  $\mu_P$  bestimmt. Dies war zu erwarten, da es sich beim chemischen Potential um eine Gleichgewichtsgröße handelt. Da der rechte Ferromagnet im Nichtgleichgewicht beschrieben wird, lässt sich dort also gar kein chemisches Potential sinnvoll definieren. Dies funktioniert nur in den Kontakten, die aufgrund ihrer Größe im Gleichgewicht verbleiben.

## 3.4 Berechnung des Tunnelstroms

Neben der im letzten Abschnitt berechneten Magnetisierung ist der Tunnelstrom als zweite wichtige Größe bei der Diskussion von strominduziertem Schalten zu nennen. Der Strom durch den Ferromagneten entspricht einem Zu- bzw. Abfließen von Ladungsträgern. Es liegt daher nahe, ihn aus der zeitlichen Änderung der Gesamtteilchenzahl zu bestimmen [60]. Natürlich ist im Rahmen des hier diskutierten stationären Modells gar keine echte Zeitabhängigkeit vorhanden. Trotzdem gelingt auch im stationären Fall die Stromberechnung auf diese Weise, was nun im Detail gezeigt werden soll. Mit Hilfe der Heisenberg-Bewegungsgleichung folgt für die gemittelte zeitliche Ableitung des

Teilchenzahloperators im rechten Ferromagneten:

$$\langle \dot{N}_R^\sigma(t) \rangle = i \langle [H, N_R^\sigma]_- (t) \rangle, \quad (3.60)$$

wobei der Teilchenzahloperator in Bloch- bzw. Wannier-Darstellung definiert ist als

$$N_R^\sigma = \sum_{\mathbf{k}_R} n_{\mathbf{k}_R\sigma} = \sum_{i_R} n_{i_R\sigma} \quad (3.61)$$

mit  $n_{\mathbf{k}_R\sigma} = c_{\mathbf{k}_R\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_R\sigma}$  und  $n_{i_R\sigma} = c_{i_R\sigma}^\dagger c_{i_R\sigma}$ . Von den Termen des Hamilton-Operators (3.2) vertauschen lediglich  $H_{RI}$  und  $H_{RP}$  nicht mit  $N_R^\sigma$ . Alle anderen Terme erhalten die Teilchenzahl, wie man leicht explizit nachrechnen kann. Es gilt für  $X = I, P$ :

$$[H_{RX}, N_R^\sigma]_- = \sum_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \left( \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} d_{\mathbf{k}_X\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_R\sigma} - \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} c_{\mathbf{k}_R\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}_X\sigma} \right) \quad (3.62)$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned} \langle \dot{N}_R^\sigma(t) \rangle &= -i \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \left( \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \langle c_{\mathbf{k}_R\sigma}^\dagger(t) d_{\mathbf{k}_X\sigma}(t) \rangle - \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} \langle d_{\mathbf{k}_X\sigma}^\dagger(t) c_{\mathbf{k}_R\sigma}(t) \rangle \right) \\ &= 2 \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \text{Im} \left( \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \langle c_{\mathbf{k}_R\sigma}^\dagger(t) d_{\mathbf{k}_X\sigma}(t) \rangle \right) \\ &= -2 \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \text{Re} \left( \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} i \langle c_{\mathbf{k}_R\sigma}^\dagger(t) d_{\mathbf{k}_X\sigma}(t) \rangle \right) \\ &\stackrel{(2.30)}{=} -2 \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \text{Re} \left( \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} G_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R\sigma}^<(t, t) \right) \\ &= -\frac{1}{\pi} \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Re} \left( \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} G_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R\sigma}^<(E) \right) \end{aligned} \quad (3.63)$$

Im letzten Schritt wurde die Greenfunktion von Zeit- auf Energieabhängigkeit fouriertransformiert. Der dabei auftretende Faktor  $\exp(iE(t-t'))$  ist wegen  $t = t'$  identisch Eins. Die rechte Seite ist also gar nicht zeitabhängig, wodurch auch  $\langle \dot{N}_R^\sigma(t) \rangle$  nur formal von  $t$  abhängt. Die gemischten Greenfunktionen wurden im letzten Abschnitt bereits berechnet (vgl. Gl. (3.26) und (3.38)). Es gilt:

$$\sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} G_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R\sigma} = \sum_{\mathbf{q}_R} \left( \sum_{X=I,P} \Delta_{\mathbf{k}_R \mathbf{q}_R\sigma}^{(X)} \right) G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R\sigma} = \sum_{\mathbf{q}_R} \Delta_{\mathbf{k}_R \mathbf{q}_R\sigma} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R\sigma} \quad (3.64)$$

Dabei wurden die Definitionen (3.40) und (3.41) der Tunnelselbstenergien ausgenutzt. Auf diesen Ausdruck können nun die analytischen Fortsetzungsregeln angewendet werden, um die kleinere Komponente der Greenfunktion zu erhalten:

$$\sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} G_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R\sigma}^< = \sum_{\mathbf{q}_R} \left( \Delta_{\mathbf{k}_R \mathbf{q}_R\sigma}^r G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R\sigma}^< + \Delta_{\mathbf{k}_R \mathbf{q}_R\sigma}^< G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R\sigma}^a \right) \quad (3.65)$$

### 3 Modellbeschreibung

Für die Änderung der Teilchenzahl gilt daher:

$$\langle \dot{N}_R^\sigma \rangle = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}_R \mathbf{q}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \operatorname{Re} \left( \Delta_{\mathbf{k}_R \mathbf{q}_R \sigma}^r(E) G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma}^<(E) + \Delta_{\mathbf{k}_R \mathbf{q}_R \sigma}^<(E) G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma}^a(E) \right) \quad (3.66)$$

Die Wellenzahlabhängigkeit der Tunnelselbstenergie kommt allein über die Tunnelkopp-  
lungen  $\epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X}$  zustande. Wie bereits im letzten Abschnitt erwähnt, bieten sich die Annah-  
men (3.35) bzw. (3.42) zur Vereinfachung des Problems an. In diesem Fall bedeutet das  
einen zusätzlichen Faktor  $\delta_{\mathbf{k}_R \mathbf{q}_R}$ , wodurch die  $\mathbf{q}_R$ -Summation eliminiert werden kann:

$$\langle \dot{N}_R^\sigma \rangle = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \operatorname{Re} \left( \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^r(E) G_{\mathbf{k}_R \sigma}^<(E) + \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^<(E) G_{\mathbf{k}_R \sigma}^a(E) \right) \quad (3.67)$$

Alle auf der rechten Seite auftretenden Größen wie Greenfunktionen und Tunnelselbst-  
energien wurden in den letzten beiden Abschnitten bereits bestimmt. Im stationären  
Zustand darf allerdings, wie schon erwähnt, keine Zeitabhängigkeit vorhanden sein, d.h.  
die linke Seite als zeitliche Änderung der Teilchenzahl muss Null ergeben (Strom- und  
Teilchenzahlerhaltung!). Dadurch ergibt sich eine zusätzliche Forderung an die Wech-  
selwirkungsselbstenergie, wie im Folgenden gezeigt werden soll. Zunächst wird dazu der  
zweite Term des Integranden weiter umgeformt:

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^< G_{\mathbf{k}_R \sigma}^a &= \left( G_{\mathbf{k}_R \sigma}^r \right)^{-1} G_{\mathbf{k}_R \sigma}^r \left( \Sigma_{\mathbf{k}_R \sigma}^< + \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^< \right) G_{\mathbf{k}_R \sigma}^a - \Sigma_{\mathbf{k}_R \sigma}^< G_{\mathbf{k}_R \sigma}^a \\ &= \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R \sigma}^r - \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^r \right) G_{\mathbf{k}_R \sigma}^< - \Sigma_{\mathbf{k}_R \sigma}^< G_{\mathbf{k}_R \sigma}^a \end{aligned} \quad (3.68)$$

Dabei wurde die Keldysh-Gleichung (3.53) benutzt. Für den gesamten Integranden ergibt  
sich damit:

$$\Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^r G_{\mathbf{k}_R \sigma}^< + \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^< G_{\mathbf{k}_R \sigma}^a = \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R \sigma}^r \right) G_{\mathbf{k}_R \sigma}^< - \Sigma_{\mathbf{k}_R \sigma}^< G_{\mathbf{k}_R \sigma}^a \quad (3.69)$$

Die Änderung der Teilchenzahl ist im Wesentlichen durch den Realteil dieses Ausdrucks  
gegeben. Da die kleinere Greenfunktion immer rein imaginär ist, muss natürlich auch  
der Term  $(E - \epsilon_{\mathbf{k}_R}) G_{\mathbf{k}_R \sigma}^<$  imaginär sein und kann somit bei der Bildung des Realteils  
weggelassen werden. Da im hier behandelten stationären Fall außerdem immer  $\langle \dot{N}_R^\sigma \rangle \equiv 0$   
gilt, folgt insgesamt also, dass jeder Ansatz für die Wechselwirkungsselbstenergie die  
Gleichung

$$\sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \operatorname{Re} \left( \Sigma_{\mathbf{k}_R \sigma}^r(E) G_{\mathbf{k}_R \sigma}^<(E) + \Sigma_{\mathbf{k}_R \sigma}^<(E) G_{\mathbf{k}_R \sigma}^a(E) \right) = 0 \quad (3.70)$$

erfüllen muss, da ansonsten die Stromerhaltung verletzt werden würde. Im nächsten Ka-  
pitel wird explizit gezeigt, dass der dort abgeleitete Nichtgleichgewichtsspektraldichte-  
ansatz dieser Bedingung genügt und somit zur Beschreibung der Wechselwirkung ver-  
wendet werden kann.

Die eigentlich interessierende Größe ist natürlich nicht die zeitliche Änderung der Teil-

chenzahl, sondern der Strom durch den rechten Ferromagneten. Allerdings stehen beide in einem sehr engen Zusammenhang zueinander. Die Teilchenzahländerung kommt nämlich dadurch zustande, dass Elektronen aus den benachbarten Regionen  $I$  und  $P$  in den Ferromagneten zu- bzw. abfließen. Somit kann sie durch vier Teilströme ausgedrückt werden<sup>3</sup>:

$$\langle \dot{N}_R^\sigma \rangle = -|J_{R \rightarrow I}| - |J_{R \rightarrow P}| + |J_{I \rightarrow R}| + |J_{P \rightarrow R}| \quad (3.71)$$

Die ersten beiden Terme entsprechen einer Verringerung der Teilchenzahl und sind deswegen negativ. Die letzten beiden Terme bedeuten ein Zufließen von Elektronen und sind entsprechend positiv. Diese vier Ströme können direkt an dem Ausdruck (3.67) abgelesen werden, indem man die Tunnelselbstenergie in ihre beiden Bestandteile aufspaltet:

$$\begin{aligned} \langle \dot{N}_R^\sigma \rangle &= -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \operatorname{Re} \left( \left( \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(I),r} + \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(P),r} \right) G_{\mathbf{k}_R \sigma}^{<} + \left( \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(I),<} + \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(P),<} \right) G_{\mathbf{k}_R \sigma}^a \right) \\ &= \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( \operatorname{Im} \left( \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(I),r} + \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(P),r} \right) \operatorname{Im} G_{\mathbf{k}_R \sigma}^{<} - \operatorname{Im} \left( \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(I),<} + \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(P),<} \right) \operatorname{Im} G_{\mathbf{k}_R \sigma}^r \right) \end{aligned} \quad (3.72)$$

Im zweiten Schritt wurde ausgenutzt, dass kleinere Greenfunktionen und Selbstenergien rein imaginär sind und dass  $\operatorname{Im} G_{\mathbf{k}_R \sigma}^r = -\operatorname{Im} G_{\mathbf{k}_R \sigma}^a$  gilt. Da die Imaginärteile von retardierten Funktionen immer negativ und die Imaginärteile von kleineren Funktionen immer positiv sind, sind die Vorzeichen der auftretenden vier Terme bekannt: die ersten beiden sind immer negativ, entsprechen also einem Abfluss von Teilchen, während die letzten beiden immer positiv sind, also einen Zufluss von Elektronen beschreiben. Anhand der Indizes kann somit folgende eindeutige Zuordnung getroffen werden:

$$|J_{R \rightarrow X}^\sigma| = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( \operatorname{Im} \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(X),r} \operatorname{Im} G_{\mathbf{k}_R \sigma}^{<} \right) \quad (3.73)$$

$$|J_{X \rightarrow R}^\sigma| = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( \operatorname{Im} \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(X),<} \operatorname{Im} G_{\mathbf{k}_R \sigma}^r \right) \quad (3.74)$$

wobei  $X$  wie üblich für  $I$  oder  $P$  steht. Als letzter Schritt zur Stromberechnung verbleibt die Definition der Stromrichtung, da *a priori* keine Richtung in dem Modell ausgezeichnet wurde. Sie wird so gewählt, dass Ströme, die von links nach rechts fließen als positiv und umgekehrt Ströme von rechts nach links als negativ angesehen werden. Also müssen die Vorzeichen „per Hand“ so gewählt werden, dass  $J_{I \rightarrow R}$  und  $J_{R \rightarrow P}$  als nach rechts fließende Ströme positiv sind. Entsprechend müssen  $J_{P \rightarrow R}$  und  $J_{R \rightarrow I}$  negatives Vorzeichen tragen. Mit dieser Festlegung ergeben sich die folgenden Zusammenhänge mit den

<sup>3</sup>Dabei handelt es sich genau genommen um die Teilchenströme. Um den Ladungsstrom zu erhalten, muss man diese mit der Elementarladung  $e$  multiplizieren.

### 3 Modellbeschreibung

bereits berechneten Beträgen der vier Teilströme:

$$J_{R \rightarrow I}^\sigma = -|J_{R \rightarrow I}^\sigma| = \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( \text{Im} \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(I),r} \text{Im} G_{\mathbf{k}_R \sigma}^< \right) \quad (3.75)$$

$$J_{R \rightarrow P}^\sigma = |J_{R \rightarrow P}^\sigma| = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( \text{Im} \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(P),r} \text{Im} G_{\mathbf{k}_R \sigma}^< \right) \quad (3.76)$$

$$J_{I \rightarrow R}^\sigma = |J_{I \rightarrow R}^\sigma| = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( \text{Im} \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(I),<} \text{Im} G_{\mathbf{k}_R \sigma}^r \right) \quad (3.77)$$

$$J_{P \rightarrow R}^\sigma = -|J_{P \rightarrow R}^\sigma| = \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( \text{Im} \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^{(P),<} \text{Im} G_{\mathbf{k}_R \sigma}^r \right) \quad (3.78)$$

Aus Symmetriegründen muss der Nettostrom, d.h. die Differenz zwischen zu- und abfließenden Strömen, zwischen Isolator und rechtem Ferromagnet gleich dem Nettostrom zwischen Paramagnet und rechtem Ferromagnet sein. Damit ist er aber auch gleich dem Nettostrom  $J^\sigma$  durch das Gesamtsystem, für den somit folgt:

$$J^\sigma = J_{R \rightarrow I}^\sigma + J_{I \rightarrow R}^\sigma = J_{R \rightarrow P}^\sigma + J_{P \rightarrow R}^\sigma \quad (3.79)$$

Für die numerische Auswertung können beide Ausdrücke zur Stromberechnung verwendet werden. Da beide in etwa denselben Rechenaufwand erfordern, spielt es letztlich keine Rolle, für welchen man sich entscheidet. Dies wird anhand der numerischen Ergebnisse in Abschnitt 5.5 näher diskutiert.

## 3.5 Alternative Tunnelkopplungen

In diesem Abschnitt soll auf mögliche Alternativen zur Modellierung der Tunnelkopplung samt ihren Vor- und Nachteilen eingegangen werden. Zunächst ist anzumerken, dass die vier Regionen  $L$ ,  $I$ ,  $R$  und  $P$  durch Standardmodelle der Vielteilchentheorie beschrieben werden, von denen bekannt ist, dass sie die jeweiligen Systeme (ferromagnetisch/paramagnetisch) zumindest näherungsweise gut beschreiben. Daher kann man die Anteile  $H_L$ ,  $H_I$ ,  $H_R$  und  $H_P$  des Modell-Hamilton-Operators als wohlbegründet ansehen. Anders sieht es mit den Kopplungen zwischen den Regionen aus. Für diese wurde folgender Ansatz verwendet:

$$\begin{aligned} H_{XY} &= \sum_{i_X j_Y \sigma} \left( T_{i_X j_Y} c_{i_X \sigma}^+ d_{j_Y \sigma} + h.c. \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_Y \sigma} \left( \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_Y} c_{\mathbf{k}_X \sigma}^+ d_{\mathbf{k}_Y \sigma} + h.c. \right) \end{aligned} \quad (3.80)$$

Wie bereits bei der Beschreibung des Modells in Abschnitt 3.2 diskutiert, bedeutet dieser Ansatz, dass ein Elektron in Region  $Y$  mit Wellenzahl  $\mathbf{k}_Y$  beim Tunneln in Region  $X$  in einen Zustand mit einer beliebigen anderen Wellenzahl  $\mathbf{k}_X$  springen kann. Das Modell macht keine Aussage darüber, in welchem Zusammenhang die „alte“ Wellenzahl  $\mathbf{k}_Y$  mit



der „neuen“ Wellenzahl  $\mathbf{k}_X$  steht. Zur konkreten Auswertung wurden die Annahmen (3.35) und (3.42) gemacht, die zur Folge haben, dass das Elektron zwar in einen Zustand mit beliebiger Wellenzahl  $\mathbf{k}_X$  tunneln kann. Beim Zurücktunneln muss es jedoch wieder die ursprüngliche Wellenzahl  $\mathbf{k}_Y$  annehmen. Die Konsequenzen dieser Annahme wurden am Ende von Abschnitt 3.3.1 diskutiert. Diese Wahl der Tunnelkopplung ist natürlich nicht die einzig mögliche. Eine offensichtliche Alternative wäre die Forderung, dass die neue und die alte Wellenzahl identisch sein müssen. Diese Version wird im ersten Unterabschnitt 3.5.1 diskutiert. Eine weitere Alternative ist die abgeschwächte Forderung, dass zwar nicht der komplette Wellenvektor beim Tunneln erhalten bleiben muss, aber doch zumindest die Komponente senkrecht zur Transportrichtung (vgl. Abschnitt 3.5.2). Als dritte und letzte Alternative wird im Unterabschnitt 3.5.3 erneut die Nichterhaltung des Wellenvektors diskutiert; im Gegensatz zu den letzten Abschnitten allerdings ohne die Annahmen (3.35) und (3.42).

### 3.5.1 Vollständige Wellenzahlerhaltung

Nimmt man an, dass der Wellenvektor beim Übergang zwischen verschiedenen Regionen erhalten bleibt, muss zunächst die bisher verwendete Notation modifiziert werden. Die Region wurde nämlich durch den Index des Wellenvektors identifiziert. Da dieser nun aber für verschiedene Regionen gleich bleiben soll, wird die Notation so geändert, dass der jeweilige Index direkt an dem Operator gesetzt wird und die Wellenzahl keinen Index mehr erhält:

$$c_{\mathbf{k}_X\sigma}^{(+)} \rightarrow c_{\mathbf{k}X\sigma}^{(+)}, \epsilon_{\mathbf{k}_X} \rightarrow \epsilon_{\mathbf{k}X}, \epsilon_{\mathbf{k}_X\mathbf{k}_Y} \rightarrow \epsilon_{\mathbf{k}XY} \quad (3.81)$$

Die Erhaltung der Wellenzahl beim Tunneln, d.h.  $\mathbf{k}_X \equiv \mathbf{k}_Y \equiv \mathbf{k}$ , ist durch diese Wahl bereits berücksichtigt. Die einzelnen Terme des Hamilton-Operators (3.2) lauten nun also:

$$H_M = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}M} - V_M) c_{\mathbf{k}M\sigma}^+ c_{\mathbf{k}M\sigma} + \frac{U_M}{2N} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q} \\ \sigma}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}M\sigma}^+ c_{\mathbf{p}-\mathbf{q}M-\sigma}^+ c_{\mathbf{p}M-\sigma} c_{\mathbf{k}M\sigma} \quad (3.82)$$

$$H_X = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}X} - V_X) d_{\mathbf{k}X\sigma}^+ d_{\mathbf{k}X\sigma} \quad (3.83)$$

$$H_{MX} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}MX} c_{\mathbf{k}M\sigma}^+ d_{\mathbf{k}X\sigma} + h.c.) \quad (3.84)$$

Bei den Hybridisierungsanteilen  $H_{MX}$  tritt nur noch eine Wellenzahlsummutation auf, wodurch dieses Modell analytisch einfacher auszuwerten sein wird. Die Magnetisierung ist analog zu Abschnitt 3.3 zu berechnen, d.h. zuerst gilt es die NEGF zu finden, um anschließend durch analytische Fortsetzung ihre kleinere Komponente zu bestimmen. Dazu sind größtenteils dieselben Schritte nötig wie bei der Auswertung des Modells ohne Wellenzahlerhaltung. Daher werden in diesem Abschnitt nur die wesentlichen Ergebnisse angegeben. Die NEGF des rechten Ferromagneten lautet:

$$G_{\mathbf{k}R\sigma}(E) = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}R} - \Sigma_{\mathbf{k}R\sigma}(E) - \Delta_{\mathbf{k}\sigma}^{(I)}(E) - \Delta_{\mathbf{k}\sigma}^{(P)}(E)} \quad (3.85)$$

### 3 Modellbeschreibung

Formal sieht sie der Greenfunktion (3.44) sehr ähnlich, allerdings unterscheiden sich beide erwartungsgemäß in den Tunnelselbstenergien. Durch die fehlende Wellenzahlsummation lauten diese nun nämlich (vgl. Gl. (3.40) und (3.41)):

$$\Delta_{\mathbf{k}\sigma}^{(I)}(E) = \frac{\epsilon_{\mathbf{k}RI}\epsilon_{\mathbf{k}IR}}{E - \epsilon_{\mathbf{k}I} - \epsilon_{\mathbf{k}IL}g_{\mathbf{k}L\sigma}\epsilon_{\mathbf{k}LI}} \quad (3.86)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}\sigma}^{(P)}(E) = \epsilon_{\mathbf{k}RP}g_{\mathbf{k}P\sigma}\epsilon_{\mathbf{k}PR} \quad (3.87)$$

Sie sind im Gegensatz zu den bisherigen Tunnelselbstenergien nicht nur über die Tunnelkopplungen  $\epsilon_{\mathbf{k}MX}$ , sondern auch durch die Dispersionen explizit wellenzahlabhängig. Die entsprechende kleinere Greenfunktion ergibt sich aus der obigen NEGF wie üblich durch analytische Fortsetzung und man erhält folgende Keldysh-Gleichung:

$$G_{\mathbf{k}R\sigma}^{<}(E) = \left( \Sigma_{\mathbf{k}R\sigma}^{<}(E) + \Delta_{\mathbf{k}\sigma}^{(I),<}(E) + \Delta_{\mathbf{k}\sigma}^{(P),<}(E) \right) |G_{\mathbf{k}R\sigma}^r(E)|^2 \quad (3.88)$$

Dieses Ergebnis ist formal identisch mit Gl. (3.53). Aufgrund der fehlenden Wellenzahlsummation in den Tunnelselbstenergien kann die kleinere Greenfunktion aber noch weiter vereinfacht werden. Mit Hilfe der Dirac-Identität [71]

$$\frac{1}{x - x_0 \pm i0^+} = \mathcal{P} \frac{1}{x - x_0} \mp i\pi\delta(x - x_0), \quad (3.89)$$

die für reelle  $x$  und  $x_0$  gilt und in der  $\mathcal{P}$  den Cauchyschen Hauptwert bezeichnet, lässt sich die paramagnetische Tunnelselbstenergie wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}\sigma}^{(P),<}(E) &= \epsilon_{\mathbf{k}RP}g_{\mathbf{k}P\sigma}^{<}(E)\epsilon_{\mathbf{k}PR} \\ &\stackrel{(2.61)}{=} -2if_P(E)\epsilon_{\mathbf{k}RP} \operatorname{Im} \left( \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}P} + i0^+} \right) \epsilon_{\mathbf{k}PR} \\ &= 2i\pi f_P(E)\epsilon_{\mathbf{k}RP}\delta(E - \epsilon_{\mathbf{k}P})\epsilon_{\mathbf{k}PR} \end{aligned} \quad (3.90)$$

Es handelt sich also im Wesentlichen um eine Deltafunktion. Multipliziert man diesen Ausdruck mit dem Betragsquadrat der retardierten Greenfunktion, erhält man:

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}\sigma}^{(P),<} |G_{\mathbf{k}R\sigma}^r|^2 &= 2i\pi f_P(E)\epsilon_{\mathbf{k}RP}\delta(E - \epsilon_{\mathbf{k}P})\epsilon_{\mathbf{k}PR} \times \\ &\times \left| \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}R} - \Sigma_{\mathbf{k}R\sigma}^r - \Delta_{\mathbf{k}\sigma}^{(I),r} - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}RP}\epsilon_{\mathbf{k}PR}}{E - \epsilon_{\mathbf{k}P} + i0^+}} \right|^2 \end{aligned} \quad (3.91)$$

Im Betragsquadrat können wegen der Deltafunktion alle Energien  $E$  durch  $\epsilon_{\mathbf{k}P}$  ersetzt werden. Dadurch ergibt sich ein Term proportional zu  $1/i0^+$  im Nenner der Greenfunktion, der offensichtlich gegen Unendlich strebt. Somit können alle anderen Terme im Nenner dagegen vernachlässigt werden. Der Gesamtausdruck ist also proportional zu  $(0^+)^2$  und verschwindet folglich.

Sofern die linke Selbstenergie  $\Sigma_{\mathbf{k}L\sigma}^r(E)$  reell ist, lässt sich die Dirac-Identität auch auf

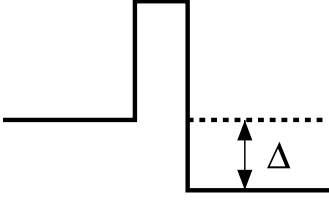


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung einer eindimensionalen Tunnelbarriere. Rechts von der Barriere liegt ein zusätzliches Potential  $V = -\Delta$  an.

die linke Greenfunktion anwenden:

$$\text{Im } g_{\mathbf{k}L\sigma}^r(E) = \text{Im} \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}L} - \Sigma_{\mathbf{k}L\sigma}^r(E) + i0^+} = -\pi\delta(E - \epsilon_{\mathbf{k}L} - \Sigma_{\mathbf{k}L\sigma}^r(E)) \quad (3.92)$$

Damit lässt sich auf analoge Weise zu oben zeigen, dass auch  $\Delta_{\mathbf{k}\sigma}^{(I),<} |G_{\mathbf{k}R\sigma}^r(E)|^2$  proportional zu  $(0^+)^2$  ist und daher ebenfalls vernachlässigt werden kann. Insgesamt bleibt also lediglich der folgende Ausdruck für die kleinere Greenfunktion übrig:

$$G_{\mathbf{k}R\sigma}^< = \Sigma_{\mathbf{k}R\sigma}^< |G_{\mathbf{k}R\sigma}^r|^2 \quad (3.93)$$

Die kleinere Greenfunktion, und damit auch die Besetzungszahl im rechten Ferromagneten, hängt also lediglich von der kleineren Wechselwirkungsselbstenergie, nicht aber von den kleineren Tunnelselbstenergien ab. Dies ist physikalisch nicht sehr plausibel, da beispielsweise wechselwirkungsfreie Metalle, für die ja  $\Sigma_{\mathbf{k}R\sigma}^r = \Sigma_{\mathbf{k}R\sigma}^< = 0$  gilt, damit niemals eine endliche Besetzung zeigen könnten!

Wie kann dieses unerwartete Verhalten verhindert werden? Eine Möglichkeit besteht darin, Quasiteilchendämpfung zu berücksichtigen. Die Schwierigkeiten kamen nämlich durch die Deltafunktionen ins Spiel, die nur verwendet werden durften, weil angenommen wurde, dass die Imaginärteile der Selbstenergien sowohl im linken Ferromagneten als auch im Paramagneten verschwinden. Dies entspricht der Vernachlässigung der Quasiteilchendämpfung. Wären endliche Imaginärteile vorhanden, müssten die Delta- durch Lorentzfunktionen ersetzt werden und es würde nicht mehr zu den  $1/i0^+$ -Divergenzen kommen. Während diese Methode zwar mathematisch gesehen das Problem lösen würde, erscheint die Lösung aus physikalischer Sicht jedoch fragwürdig. Es ist seit langem bekannt [116], dass viele paramagnetische Metalle, wie z.B. Al, qualitativ und zum Teil sogar quantitativ sehr gut durch wechselwirkungsfreie Modelle beschrieben werden können. Daher ist kaum zu erwarten, dass die Vernachlässigung der Wechselwirkung zu einem so deutlichen Versagen des Modells führen sollte. Damit bleibt als zweite Möglichkeit nur die Schlussfolgerung, dass die Annahme der exakten Wellenzahlerhaltung beim Tunneln physikalisch nicht sinnvoll ist.

Dies lässt sich an einem Standardbeispiel der elementaren Quantenmechanik plausibel machen, nämlich dem Tunneln durch eine eindimensionale Potentialbarriere (vgl. Abb. 3.2). Vernachlässigt man die Wechselwirkung, so lautet die Energie eines Elektrons links von der Barriere  $E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}$ . Rechts der Barriere ist zusätzlich das Potential zu berücksichtigen, daher gilt dort  $E_2 = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} - \Delta$ . Da der Tunnelprozess unter Energieerhaltung stattfindet [117], muss zusätzlich  $E_1 \stackrel{!}{=} E_2$  erfüllt sein. Für  $\Delta \neq 0$  ist diese Bedingung

aber nur zu erfüllen, wenn das Elektron beim Tunneln seinen Wellenvektor ändert, d.h. wenn  $k_1 \neq k_2$  gilt. Somit ist die vollständige Erhaltung der Wellenzahl nicht mit der Energieerhaltung kompatibel! Falls das Elektron anschließend wieder von rechts nach links zurücktunnelt, wird es erneut den ursprünglichen Wellenvektor  $k_1$  annehmen. Damit sind die beiden Annahmen (3.35) und (3.42) in diesem einfachen Fall sogar exakt erfüllt.

### 3.5.2 Erhaltung der Parallelkomponente der Wellenzahl

Da die vollständige Erhaltung des Wellenvektors zu physikalisch unplausiblen Ergebnissen führt, kann offenbar maximal eine Teilkomponente erhalten bleiben. In vielen Arbeiten wird davon ausgegangen, dass die Wellenzahlkomponente  $\mathbf{k}_{\parallel}$  senkrecht zur Transportrichtung (also parallel zur Schicht) erhalten bleibt [65]. Auch das hier vorgestellte Modell kann prinzipiell auf diese Situation umgeschrieben werden [86]. Dazu muss jede der vier Regionen in eine gewisse Anzahl paralleler Schichten zerlegt werden, die jeweils als zweidimensionales Bravais-Gitter beschrieben werden können. Aus der Dispersion wird dann eine Dispersionsmatrix

$$\epsilon_{\mathbf{k}_M} \Rightarrow \epsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}M}^{nm} = \frac{1}{N} \sum_{i_M j_M} T_{i_M j_M}^{nm} e^{-i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{R}_{i_M} - \mathbf{R}_{j_M})}, \quad (3.94)$$

die das Hopping zwischen zwei Schichten  $n$  und  $m$  innerhalb der Region  $M$  beschreibt. Unter der Annahme, dass das Hopping uniform und nur zwischen nächsten Nachbarn erfolgt, lässt sich die Dispersionsmatrix auch folgendermaßen schreiben [118]:

$$\epsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}M} = \begin{cases} T_{0,M}^n + t_M \gamma_{\parallel,M}(\mathbf{k}_{\parallel}) & n = m \\ t_M \gamma_{\perp,M}(\mathbf{k}_{\parallel}) & n = m - 1 \\ t_M \gamma_{\perp,M}^*(\mathbf{k}_{\parallel}) & n = m + 1 \end{cases} \quad (3.95)$$

wobei  $t_M$  die bereits eingeführten Hoppingparameter sind und  $\gamma_{\parallel,M}$  bzw.  $\gamma_{\perp,M}$  die Dispersionen innerhalb und zwischen den Schichten bezeichnen. Diese liegen tabelliert vor, beispielsweise gilt für das bcc(100)-Gitter [118]:

$$\gamma_{\parallel,M} = 0 \quad (3.96)$$

$$\gamma_{\perp,M} = 1 + e^{-ik_{\parallel,x}} + e^{-ik_{\parallel,y}} + e^{-i(k_{\parallel,x} + k_{\parallel,y})} \quad (3.97)$$

Offenbar wird der Formalismus deutlich komplizierter, da zum einen nun alle Größen zusätzlich schichtabhängig berechnet werden müssen. Zum anderen kann die Wellenzahlsumme nicht mehr in eine einfache Energieintegration überführt werden, die die numerische Auswertung erheblich vereinfacht. Bisher war das System nämlich translationssymmetrisch und alle Größen hingen nur über die Dispersion  $\epsilon_{\mathbf{k}_M}$  von der Wellenzahl ab, sofern die Tunnelkopplung  $\epsilon_{\mathbf{k}_M \mathbf{k}_X} \equiv \epsilon_{MX}$  als wellenzahlunabhängig angenommen

wird. Daher konnte folgende Ersetzung verwendet werden:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_M} F(\epsilon_{\mathbf{k}_M}) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \rho_0(E) F(E) \quad (3.98)$$

Dabei bezeichnet  $\rho_0(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_M} \delta(E - \epsilon_{\mathbf{k}_M})$  die freie Bloch-Zustandsdichte. Wegen den Dispersionen  $\gamma_{||,M}$  und insbesondere  $\gamma_{\perp,M}$  muss die zweidimensionale Wellenzahlsumme nun explizit ausgeführt werden. Dies stellt für die numerische Auswertung einen erheblichen Mehraufwand dar, da jede zusätzliche Integration die Rechenzeit um etwa den Faktor 1000 erhöht<sup>4</sup>. Darüberhinaus müssen die spinabhängigen Besetzungszahlen in jeder Schicht (abgesehen von den beiden Randschichten) selbstkonsistent und im Nichtgleichgewicht bestimmt werden. Die Zahl der Schichten, in die jede Region zerlegt werden muss, kann als zusätzlicher Parameter betrachtet werden. Allerdings sollten die aus dem Experiment bekannten Größenverhältnisse ungefähr eingehalten werden. Für den Isolator würden also ein bis zwei Schichten reichen, da er in realen Tunnelstrukturen typischerweise auch nur wenige Atomlagen dick ist [86]. Der rechte Ferromagnet müsste schon deutlich dicker gewählt werden, insbesondere da in zu dünnen Schichten Ferromagnetismus nicht sehr stabil ist [118]. Die beiden Kontakte, also der linke Ferromagnet und der Paramagnet, sollen im Wesentlichen Bulk-Verhalten zeigen und müssen daher in entsprechend viele Schichten zerlegt werden. Daher sind für die gesamte Struktur schätzungsweise mindestens 20 Schichten zur Beschreibung realer Tunnelstrukturen nötig. Ohne Supercomputer wird ein solches Modell kaum vernünftig auswertbar sein. Das hier vorgeschlagene Modell mit teilweiser Wellenzahlerhaltung stellt somit eine aus numerischer Sicht deutlich überlegene Alternative dar.

### 3.5.3 Exakte Lösung ohne Wellenzahlerhaltung

Die Hybridisierung wurde bei der Auswertung des Modells in Abschnitt 3.3 nicht exakt, sondern nur im Rahmen der Annahmen (3.35) und (3.42), die im Folgenden als Diagonalannahmen bezeichnet werden, behandelt. Die Konsequenzen dieser Annahmen wurden bereits diskutiert. Es bleibt die offene Frage, ob das Modell auch ohne diese Annahmen bezüglich der Hybridisierung exakt zu lösen ist. Im allgemeinen Fall wird dies wohl nicht möglich sein, da die Bewegungsgleichungen ohne die Annahme nicht mehr entkoppelt werden können. Aber für wellenzahlunabhängige Hybridisierungen  $\epsilon_{\mathbf{k}_M \mathbf{k}_X} = \epsilon_{MX}$  ist eine exakte Lösung tatsächlich möglich, wie im Folgenden gezeigt werden soll. Ausgangspunkt ist die Bewegungsgleichung der nichtdiagonalen Greenfunktion  $G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} = \langle\langle c_{\mathbf{q}_R \sigma}; c_{\mathbf{k}_R \sigma}^+ \rangle\rangle$  des rechten Ferromagneten. Für sie gilt analog zu Gl. (3.21):

$$(E - \epsilon_{\mathbf{q}_R} - \Sigma_{\mathbf{q}_R \sigma}) G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} = \delta_{\mathbf{k}_R \mathbf{q}_R} + \sum_{\mathbf{k}_I} \epsilon_{RI} G_{\mathbf{k}_I \mathbf{k}_R \sigma} + \sum_{\mathbf{k}_P} \epsilon_{RP} G_{\mathbf{k}_P \mathbf{k}_R \sigma} \quad (3.99)$$

Die Greenfunktion  $G_{\mathbf{k}_P \mathbf{k}_R \sigma}$  im letzten Term wurde bereits früher berechnet (s. Gl. (3.26)), wobei die Diagonálnäherung nicht verwendet wurde. Daher kann sie unmittel-

<sup>4</sup>Die genaue Größenordnung ist von der vorgegebenen Genauigkeit abhängig.

### 3 Modellbeschreibung

bar übernommen werden. Nach Summation über alle Wellenzahlen des Paramagneten  $\mathbf{k}_P$  gilt somit:

$$\sum_{\mathbf{k}_P} G_{\mathbf{k}_P \mathbf{k}_R \sigma} = \underbrace{\left( \sum_{\mathbf{k}_P} g_{\mathbf{k}_P \sigma} \right)}_{\equiv g_{P\sigma}} \epsilon_{PR} \sum_{\mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} \quad (3.100)$$

Auch zur Bestimmung der zweiten gemischten Greenfunktion  $G_{\mathbf{k}_I \mathbf{k}_R \sigma}$  können bereits bekannte Ergebnisse verwendet werden. Ihre Bewegungsgleichung lautet (vgl. Gl. (3.27)):

$$\begin{aligned} (E - \epsilon_{\mathbf{k}_I}) G_{\mathbf{k}_I \mathbf{k}_R \sigma} &= \sum_{\mathbf{k}_L} \epsilon_{IL} G_{\mathbf{k}_L \mathbf{k}_R \sigma} + \sum_{\mathbf{q}_R} \epsilon_{IR} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} \\ &\stackrel{(3.32)}{=} \sum_{\mathbf{k}_L \mathbf{q}_I} \epsilon_{IL} g_{\mathbf{k}_L \sigma} \epsilon_{LI} G_{\mathbf{q}_I \mathbf{k}_R \sigma} + \sum_{\mathbf{q}_R} \epsilon_{IR} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} \\ &= \Delta_{L\sigma} \sum_{\mathbf{q}_I} G_{\mathbf{q}_I \mathbf{k}_R \sigma} + \epsilon_{IR} \sum_{\mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} \end{aligned} \quad (3.101)$$

Dabei wurde die Tunnelselbstenergie  $\Delta_{L\sigma} = \sum_{\mathbf{k}_L} \epsilon_{IL} g_{\mathbf{k}_L \sigma} \epsilon_{LI}$  analog zu Gl. (3.34) definiert. Aufgrund der fehlenden Wellenzahlabhängigkeit der Tunnelkopplungen ist sie ebenfalls nicht wellenzahlabhängig. Die letzte Gleichung wird mit der freien Isolatorgreenfunktion  $g_{\mathbf{k}_I \sigma} = 1/(E - \epsilon_{\mathbf{k}_I})$  multipliziert und anschliessend über alle Isolatorwellenzahlen  $\mathbf{k}_I$  summiert. Dies führt zu einer Bestimmungsgleichung für die gemischte Greenfunktion:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}_I} G_{\mathbf{k}_I \mathbf{k}_R \sigma} &= \underbrace{\left( \sum_{\mathbf{k}_I} g_{\mathbf{k}_I \sigma} \right)}_{\equiv g_{I\sigma}} \Delta_{L\sigma} \sum_{\mathbf{q}_I} G_{\mathbf{q}_I \mathbf{k}_R \sigma} + \underbrace{\left( \sum_{\mathbf{k}_I} g_{\mathbf{k}_I \sigma} \right)}_{\equiv g_{I\sigma}} \epsilon_{IR} \sum_{\mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} \\ &= g_{I\sigma} \Delta_{L\sigma} \sum_{\mathbf{k}_I} G_{\mathbf{k}_I \mathbf{k}_R \sigma} + g_{I\sigma} \epsilon_{IR} \sum_{\mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} \end{aligned} \quad (3.102)$$

Die wellenzahlgemittelte gemischte Greenfunktion lässt sich somit auf die Greenfunktion des rechten Ferromagneten zurückführen:

$$\sum_{\mathbf{k}_I} G_{\mathbf{k}_I \mathbf{k}_R \sigma} = \frac{g_{I\sigma} \epsilon_{IR}}{1 - g_{I\sigma} \Delta_{L\sigma}} \sum_{\mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} \quad (3.103)$$

Setzt man nun beide Ausdrücke für die gemischten Greenfunktionen (3.100) und (3.103) in die ursprüngliche Bewegungsgleichung (3.99) ein, multipliziert mit

$$F_{\mathbf{q}_R \sigma} \equiv \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{q}_R} - \Sigma_{\mathbf{q}_R \sigma}} \quad (3.104)$$

und summiert anschließend über alle Wellenzahlen  $\mathbf{q}_R$  erhält man:

$$\sum_{\mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} = F_{\mathbf{k}_R \sigma} + F_{R\sigma} \left( \frac{\epsilon_{RI} g_{I\sigma} \epsilon_{IR}}{1 - g_{I\sigma} \Delta_{L\sigma}} + \epsilon_{RP} g_{P\sigma} \epsilon_{PR} \right) \sum_{\mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} \quad (3.105)$$

### 3.5 Alternative Tunnelkopplungen

wobei zusätzlich  $F_{R\sigma} = \sum_{\mathbf{k}_R} F_{\mathbf{k}_R\sigma}$  definiert wurde. An dieser Stelle bietet es sich an, den Term in der Klammer analog zu Gl. (3.43) als Gesamttunnelselbstenergie zu definieren:

$$\Delta_{R\sigma} = \Delta_{R\sigma}^{(I)} + \Delta_{R\sigma}^{(P)} \equiv \frac{\epsilon_{RI} g_{I\sigma} \epsilon_{IR}}{1 - g_{I\sigma} \Delta_{L\sigma}} + \epsilon_{RP} g_{P\sigma} \epsilon_{PR} \quad (3.106)$$

Damit ist die wellenzahlgemittelte nichtdiagonale rechte Greenfunktion bestimmt:

$$\sum_{\mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} = \frac{F_{\mathbf{k}_R \sigma}}{1 - F_{R\sigma} \Delta_{R\sigma}} \quad (3.107)$$

Für die Berechnung der Magnetisierung ist natürlich nur die diagonale Greenfunktion  $G_{\mathbf{k}_R \sigma} = G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_R \sigma}$  von Bedeutung. Für ihre Berechnung wird aber die nichtdiagonale Funktion benötigt, wie man anhand ihrer Bewegungsgleichung leicht erkennt:

$$(E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R \sigma}) G_{\mathbf{k}_R \sigma} = 1 + \Delta_{R\sigma} \sum_{\mathbf{q}_R} G_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_R \sigma} \quad (3.108)$$

Mit Hilfe der bereits geleisteten Vorarbeit ist die vollständige Berechnung dieser Funktion nun problemlos möglich:

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}_R \sigma} &\stackrel{(3.107)}{=} F_{\mathbf{k}_R \sigma} + F_{\mathbf{k}_R \sigma} \Delta_{R\sigma} \frac{F_{\mathbf{k}_R \sigma}}{1 - F_{R\sigma} \Delta_{R\sigma}} \\ &= F_{\mathbf{k}_R \sigma} \left( \frac{1 - F_{R\sigma} \Delta_{R\sigma} + F_{\mathbf{k}_R \sigma} \Delta_{R\sigma}}{1 - F_{R\sigma} \Delta_{R\sigma}} \right) \\ &= F_{\mathbf{k}_R \sigma} \frac{1 - F'_{\mathbf{k}_R \sigma} \Delta_{R\sigma}}{1 - F_{R\sigma} \Delta_{R\sigma}} \end{aligned} \quad (3.109)$$

Der Strich an der Greenfunktion bedeutet dabei, dass über alle Wellenzahlen außer  $\mathbf{k}_R$  summiert wird, d.h.

$$F'_{\mathbf{k}_R \sigma} = \sum_{\substack{\mathbf{q}_R \neq \mathbf{k}_R \\ \mathbf{q}_R}} F_{\mathbf{q}_R \sigma} = F_{R\sigma} - F_{\mathbf{k}_R \sigma}. \quad (3.110)$$

Alternativ kann die Greenfunktion auch auf ihre „Standardform“ umgeformt werden:

$$G_{\mathbf{k}_R \sigma} = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R \sigma} - \hat{\Delta}_{R\sigma}} \quad (3.111)$$

wobei die effektive Tunnelselbstenergie  $\hat{\Delta}_{R\sigma}$  folgendermaßen definiert ist:

$$\hat{\Delta}_{R\sigma} = \frac{\Delta_{R\sigma}}{1 - F'_{\mathbf{k}_R \sigma} \Delta_{R\sigma}} \quad (3.112)$$

Der Unterschied zur Greenfunktion mit Diagonalannahme (3.44) liegt im Nenner der effektiven Tunnelselbstenergie. Mit Diagonalannahme ist er nämlich exakt 1, d.h. der Term  $F'_{\mathbf{k}_R \sigma} \Delta_{R\sigma}$  fehlt. Dieser hängt zum einen von allen von  $\mathbf{k}_R$  verschiedenen Wellenzahlen ab. Gerade diese wurden bei der Diagonalannahme aber vernachlässigt und konnten dort

### 3 Modellbeschreibung

also gar nicht auftreten. Außerdem taucht die Tunnelselbstenergie in dem neuen Term auf. Da diese quadratisch von den Hybridisierungen abhängt, kann der Term für kleine Werte der Hybridisierung gegen 1 vernachlässigt werden, wodurch die Lösung mit Diagonalannahme reproduziert wird. Dies stimmt mit der früheren Behauptung überein, dass die Diagonalannahme für nicht allzu große Hybridisierungen exakt erfüllt ist.

Es ist also in der Tat möglich, die NEGF auch ohne die Diagonalannahme herzuleiten. Um wichtige Größen wie die Magnetisierung berechnen zu können, wird zusätzlich noch ihre kleinere Komponente benötigt. Diese erhält man wie üblich mit Hilfe der Keldysh-Gleichung, die an Gl. (3.111) unmittelbar abgelesen werden kann:

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}^< = (\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^< + \hat{\Delta}_{R\sigma}^<) |G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r|^2 \quad (3.113)$$

Die retardierte Greenfunktion hat dieselbe Form wie die NEGF, es muss lediglich an alle Größen ein Index  $r$  angefügt wird. Die Berechnung der kleineren effektiven Tunnelselbstenergie  $\hat{\Delta}_{R\sigma}^<$  ist allerdings sehr problematisch. Der Grund hierfür ist ihre relativ komplizierte Struktur, insbesondere die Funktionen im Nenner. Dieser muss zunächst beseitigt werden, indem man mit seinem Kehrwert multipliziert. Diese Multiplikation ist aber nicht eindeutig, da nicht klar ist, ob sie von links oder rechts erfolgen muss. Die beiden Alternativen lauten:

$$\hat{\Delta}_{R\sigma} - F'_{\mathbf{k}_R\sigma} \Delta_{R\sigma} \hat{\Delta}_{R\sigma} = \Delta_{R\sigma} \quad (3.114)$$

$$\hat{\Delta}_{R\sigma} - \hat{\Delta}_{R\sigma} F'_{\mathbf{k}_R\sigma} \Delta_{R\sigma} = \Delta_{R\sigma} \quad (3.115)$$

Bis hierher sind beide Ausdrücke natürlich noch äquivalent. Nun müssen aber die analytischen Fortsetzungsregeln zur Bestimmung der kleineren Komponenten auf beide Gleichungen angewendet werden und dabei ergeben sich Differenzen. Man erhält:

$$\hat{\Delta}_{R\sigma}^< - F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime r} \Delta_{R\sigma}^r \hat{\Delta}_{R\sigma}^< - F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime r} \Delta_{R\sigma}^< \hat{\Delta}_{R\sigma}^a - F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime <} \Delta_{R\sigma}^a \hat{\Delta}_{R\sigma}^a = \Delta_{R\sigma}^< \quad (3.116)$$

$$\hat{\Delta}_{R\sigma}^< - \hat{\Delta}_{R\sigma}^r F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime r} \Delta_{R\sigma}^< - \hat{\Delta}_{R\sigma}^r F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime <} \Delta_{R\sigma}^a - \hat{\Delta}_{R\sigma}^< F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime a} \Delta_{R\sigma}^a = \Delta_{R\sigma}^< \quad (3.117)$$

beziehungsweise nach Umstellen nach  $\hat{\Delta}_{R\sigma}^<$ :

$$\hat{\Delta}_{R\sigma}^< = \frac{(1 - (F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime a} - F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime r}) \Delta_{R\sigma}^a) \Delta_{R\sigma}^< + F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime <} (\Delta_{R\sigma}^a)^2}{|1 - F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime r} \Delta_{R\sigma}^r|^2} \quad (3.118)$$

$$\hat{\Delta}_{R\sigma}^< = \frac{\Delta_{R\sigma}^< + F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime <} |\Delta_{R\sigma}^r|^2}{|1 - F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime r} \Delta_{R\sigma}^r|^2} \quad (3.119)$$

Nun sind deutliche Unterschiede zwischen beiden Versionen erkennbar. Insbesondere führt die erste Version zu einer kleineren Selbstenergie, die endlichen Realteil besitzt, während die zweite Version eine rein imaginäre effektive Selbstenergie ergibt, da sowohl  $\Delta_{R\sigma}^<$  als auch  $F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime <}$  rein imaginär sind. Aufgrund der Keldysh-Gleichung führt Gl. (3.118) also auch zu einem endlichen Realteil für die kleinere Greenfunktion und wegen (s.



Gl.(3.17))

$$\langle n_{R,\sigma} \rangle \propto i \int dE \sum_{\mathbf{k}_R} G_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) \quad (3.120)$$

würde das eine komplexwertige Besetzungszahl ergeben, was physikalisch natürlich unsinnig wäre. Damit kann geschlossen werden, dass nur die zweite Version korrekt sein kann. Zur vollständigen Lösung des Problems benötigt man also noch Ausdrücke für  $\Delta_{R\sigma}^<$  und  $F_{\mathbf{k}_R\sigma}'^<$ . Die kleinere Greenfunktion kann unmittelbar durch die entsprechende Keldysh-Gleichung berechnet werden:

$$F_{\mathbf{k}_R\sigma}'^< = \sum_{\mathbf{q}_R \neq \mathbf{k}_R} F_{\mathbf{q}_R\sigma}^< = \sum_{\mathbf{q}_R \neq \mathbf{k}_R} \Sigma_{\mathbf{q}_R\sigma}^< |F_{\mathbf{q}_R\sigma}^r|^2 \quad (3.121)$$

Die Wechselwirkungsselbstenergie wird an dieser Stelle wiederum als bekannt vorausgesetzt. Die Berechnung der kleineren Tunnelselbstenergie gestaltet sich etwas mühseliger. Zunächst bietet es sich an sie in ihre beiden Teile  $\Delta_{R\sigma}^{(I),<}$  und  $\Delta_{R\sigma}^{(P),<}$  zu zerlegen. Die Bestimmung von  $\Delta_{R\sigma}^{(P),<}$  bereitet keinerlei Probleme, da es sich im Wesentlichen um eine Gleichgewichtsgreenfunktion handelt:

$$\begin{aligned} \Delta_{R\sigma}^{(P),<} &= \sum_{\mathbf{k}_P} \epsilon_{RP} g_{\mathbf{k}_P\sigma}^< \epsilon_{PR} \\ &= -2i f_P(E) \sum_{\mathbf{k}_P} \epsilon_{RP} \text{Im} \left( g_{\mathbf{k}_P\sigma}^r \right) \epsilon_{PR} \\ &= -2i f_P(E) \text{Im} \Delta_{R\sigma}^{(P),r} \end{aligned} \quad (3.122)$$

Bei  $\Delta_{R\sigma}^{(I)}$  steht erneut eine Greenfunktion im Nenner. Daher muss man wie bei der Berechnung von  $\hat{\Delta}_{R\sigma}^<$  vorgehen. Auch hier zeigt sich, dass nur eine der beiden Multiplikationsmöglichkeiten, nämlich die von links, zu einer rein imaginären kleineren Tunnelselbstenergie führt. Man erhält:

$$\Delta_{R\sigma}^{(I),<} = \epsilon_{RI} \left| \frac{g_{I\sigma}^r}{1 - g_{I\sigma}^r \Delta_{L\sigma}^r} \right| \epsilon_{IR} \Delta_{L\sigma}^< \quad (3.123)$$

mit der linken kleineren Tunnelselbstenergie

$$\Delta_{L\sigma}^< = -2i f_L(E) \sum_{\mathbf{k}_L} \epsilon_{IL} \text{Im} \left( g_{\mathbf{k}_L\sigma}^r \right) \epsilon_{LI} \quad (3.124)$$

Damit sind alle Ausdrücke bestimmt, um die kleinere Greenfunktion (3.113) berechnen zu können. Die numerische Auswertung erfolgt in Abschnitt 5.10.

### 3.6 Einfaches Hybridisierungsmodell

Im Hinblick auf strominduziertes Schalten spielt natürlich insbesondere der Transport eine entscheidende Rolle. Dieser wird im Rahmen des in Abschnitt 3.2 vorgestellten Modells durch Hybridisierungen zwischen den beteiligten Regionen modelliert. Für die Diskussion und das Verständnis der numerischen Ergebnisse wird es sich als sehr nützlich erweisen, das Verhalten der Hybridisierung und ihre Abhängigkeit von den Modellparametern zu verstehen. Dies kann zwar auch am vollen Modell (3.2) diskutiert werden, aber ist dort natürlich stark von anderen Effekten, wie der Coulomb-Wechselwirkung, überlagert. Daher wird in diesem Abschnitt der einfachste denkbare Modell-Hamilton-Operator definiert, der es ermöglicht den Effekt der Hybridisierung zwischen zwei Bändern zu diskutieren. Er lautet:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha, \beta=1}^2 \epsilon_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}\alpha}^+ c_{\mathbf{k}\beta} \quad (3.125)$$

Die Indizes  $\alpha$  und  $\beta$  kennzeichnen die beiden Bänder. Es werden nur zwei Bänder betrachtet, daher läuft die Summe nur von 1 bis 2. Die Dispersion wird somit zu einer  $2 \times 2$ -Matrix, die folgendermaßen gewählt wird:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}}^{(1)} & \epsilon \\ \epsilon & \epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} \end{pmatrix} \quad (3.126)$$

Die beiden Diagonalelemente sind „normale“ Tight-Binding-Dispersionen, die Bandschwerpunkt und -breite enthalten, und das Nichtdiagonalelement  $\epsilon$  ist ein Maß für die Stärke der Hybridisierung.

Das Verhalten dieses Modells lässt sich am leichtesten anhand seiner Quasiteilchenzustandsdichte diskutieren, die aus der zugehörigen Greenfunktion  $G_{\mathbf{k}\alpha}^r(E) = \langle \langle c_{\mathbf{k}\alpha}; c_{\mathbf{k}\alpha}^+ \rangle \rangle_E^r$  berechnet werden kann. Durch Aufstellen und Lösen der Bewegungsgleichung dieser Funktion ergibt sich

$$G_{\mathbf{k}\alpha}^r(E) = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} - \frac{\epsilon^2}{E - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(\bar{\alpha})} + i0^+} + i0^+} \quad (3.127)$$

wobei mit  $\bar{\alpha}$  das von  $\alpha$  verschiedene Band bezeichnet wird. Anhand dieser Greenfunktion kann der Einfluss von unterschiedlichen Bandschwerpunkten  $T_{0,\alpha}$ , Bandbreiten  $W_{\alpha}$  und der Hybridisierungsstärke  $\epsilon$  untersucht werden.

Eine weitere Größe, die von Bedeutung ist, ist das spektrale Gewicht  $\gamma_{\alpha}$  der Bänder. Deren Einfluss kann mit dem einfachen Modell (3.125) nicht untersucht werden, da beide Bänder immer das spektrale Gewicht  $\gamma_{\alpha} = 1$  besitzen, wie an der Greenfunktion erkannt werden kann. Man müsste also eigentlich das Modell entsprechend erweitern. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit genügt es aber auch, die beiden Bänder „per Hand“ aufzuspalten. Dazu zerlegt man jedes Band in zwei Unterbänder, die beim „alten“ Bandschwerpunkt  $T_{0,\alpha}$  bzw. bei  $T_{0,\alpha} + V_{\alpha}$  liegen.  $V_{\alpha}$  sind dabei neu auftretende Parameter, die den Abstand der jeweiligen Subbänder bestimmen. Die spektralen Gewichte werden so gewählt, dass

### 3.6 Einfaches Hybridisierungsmodell

das Subband bei  $T_{0,\alpha}$  das Gewicht  $\gamma_\alpha$  besitzt. Da das gesamte Band nach wie vor normiert sein muss, muss das zweite Subband bei  $T_{0,\alpha} + V_\alpha$  damit das Gewicht  $1 - \gamma_\alpha$  haben. Mathematisch wird dies durch folgende Greenfunktion erreicht:

$$G_{\mathbf{k}\alpha}^r(E) = \frac{\gamma_\alpha}{E - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} - \frac{\epsilon^2}{E - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(\bar{\alpha})} + i0^+} + i0^+} + \frac{1 - \gamma_\alpha}{E - V_\alpha - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} - \frac{\epsilon^2}{E - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(\bar{\alpha})} + i0^+} + i0^+} \quad (3.128)$$

Dabei beschreibt der erste Term das Subband bei  $T_{0,\alpha}$ , der zweite das bei  $T_{0,\alpha} + V_\alpha$ . Liegen beide Subbänder bei der gleichen Energie, d.h.  $V_\alpha = 0$ , so ergibt sich die ursprüngliche Greenfunktion (3.127).

Dieses vereinfachte Hybridisierungsmodell wird in Abschnitt 5.1 numerisch ausgewertet und der Einfluss der einzelnen Parameter wird dort näher diskutiert.



## 4 Nichtgleichgewichtsspektraldichteansatz

Im vorangegangenen Kapitel wurde beschrieben, wie ein magnetischer Tunnelkontakt im Rahmen des Keldysh-Formalismus theoretisch modelliert werden kann. Eine der zentralen Größen des Modells, die Wechselwirkungsselbstenergie, wurde dabei jedoch nicht explizit angegeben. Da ihre konkrete Gestalt für die analytische Ableitung der Theorie nicht relevant war, konnte sie als bekannt vorausgesetzt werden. Zur Vervollständigung der Theorie und insbesondere um eine numerische Auswertung des Modells zu ermöglichen, kommt man aber nicht umhin, einen expliziten Ausdruck für die Selbstenergie zu finden. Da das Gesamtmodell, beschrieben durch den Hamilton-Operator (3.2), aus zwei indirekt gekoppelten Hubbard-Modellen besteht, wird dies sicherlich nicht exakt gelingen. Man ist somit auf Näherungen angewiesen, die die Physik des Modells möglichst wenig verfälschen. Dieser Punkt stellt eine der Hauptschwierigkeiten der Vielteilchentheorie dar. Für die vorliegende Theorie wird die Suche nach einer geeigneten Selbstenergie allerdings dadurch erleichtert, dass natürlich schon eine ganze Reihe von bewährten Näherungen für das Hubbard-Modell im Gleichgewicht vorliegen. Einige davon wurden in Abschnitt 3.1 bereits erwähnt. Es bietet sich an, von den Grundideen dieser Näherungen auszugehen und zu untersuchen, ob sie sich (mit vertretbarem Aufwand) ins Nichtgleichgewicht übertragen lassen.

Die einfachste, nicht-triviale Näherung zur Lösung des Hubbard-Modells ist die sogenannte Mean Field(MF)-Näherung. Dabei geht man davon aus, dass sich ein Elektron in einem mittleren Feld bewegt, das von allen anderen Elektronen verursacht wird. Mathematisch wird dies durch die Ersetzung [101]

$$AB \xrightarrow{MF} A\langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle \quad (4.1)$$

erreicht, wobei  $A$  und  $B$  für beliebige Elektronenkonstruktionsoperatoren stehen. Auf den Hubbard-Hamilton-Operator (3.3) angewendet, ergibt sich nach Fouriertransformation auf Wellenzahlen:

$$H_M \xrightarrow{MF} \sum_{\mathbf{k}_M \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}_M} - V_M - U_M \langle n_{M,-\sigma} \rangle) c_{\mathbf{k}_M \sigma}^+ c_{\mathbf{k}_M \sigma} \quad (4.2)$$

An diesem Ausdruck lässt sich die MF-Selbstenergie  $\Sigma_{\mathbf{k}_M \sigma}^{MF} \equiv U_M \langle n_{M,-\sigma} \rangle$  unmittelbar ablesen. Die MF-Näherung lässt sich also offenbar sehr leicht ins Nichtgleichgewicht übertragen, da sie unmittelbar gar nicht von den Hybridisierungstermen betroffen ist. Allerdings überschätzt sie die magnetische Stabilität sehr deutlich [101]. Beim strominduzierten Schalten sollte gerade diese aber eine sehr entscheidende Rolle spielen, da das Umschalten der Magnetisierung bei zu hoher magnetischer Stabilität vermutlich stark unterdrückt wird. Es erscheint daher sinnvoll, zu einer besseren Näherung, wie bei-

spielsweise dem sogenannten Spektraldichteansatz (SDA) [105, 119], überzugehen, die ein realistischeres Verhalten des Ferromagneten liefert. Dessen Grundidee besteht darin, die Spektraldichte des Ferromagneten per Ansatz so zu wählen, dass sie lediglich aus zwei deltaförmigen Polen besteht. Diese Wahl ist dadurch motiviert, dass sie im Fall verschwindender Bandbreite,  $W \rightarrow 0$ , exakt wird [104]. Kann diese Methode ins Nichtgleichgewicht erweitert werden? Die Antwort auf diese Frage hängt natürlich von der Glaubwürdigkeit des Ansatzes ab. Durch die Kopplung des Ferromagneten an die benachbarten Schichten wird sich auch seine Spektraldichte ändern. Dabei ist keineswegs sichergestellt, dass es bei einer einfachen Zwei-Pol-Struktur bleibt. Daher erscheint der Ansatz im Nichtgleichgewicht zumindest fragwürdig. Glücklicherweise existiert aber ein alternativer Zugang zur SDA, der zwar letztlich zur selben Selbstenergie führt, aber ohne den Zwei-Pol-Ansatz für die Spektraldichte auskommt. Dabei handelt es sich um eine Hochenergieentwicklung, wodurch sichergestellt werden kann, dass die Selbstenergie bzw. die Spektraldichte auf jeden Fall das korrekte Hochenergieverhalten zeigt. Eine solche Entwicklung ist auch im Nichtgleichgewicht ohne weiteres möglich, wodurch die SDA zu einer Nichtgleichgewichts-SDA (NSDA) erweitert werden kann. Diese wird in den folgenden Abschnitten abgeleitet.

## 4.1 Hochenergieentwicklung

Zur Formulierung der Hochenergieentwicklung werden die Momente der Spektraldichte

$$S_{AB}(t, t') = \frac{1}{2\pi} \langle [A(t), B(t')]_+ \rangle, \quad (4.3)$$

benötigt. Sie sind folgendermaßen definiert [71]:

$$M_{AB}^{(n)} = \int_{-\infty}^{\infty} dE E^n S_{AB}(E) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.4)$$

$A$  und  $B$  stehen dabei für beliebige Konstruktionsoperatoren in Heisenberg-Darstellung. Alternativ können sie auch mit Hilfe von Kommutatoren berechnet werden:

$$M_{AB}^{(n)} = \langle [[\dots [[A, H]_-, H]_- \dots H]_-, [H, \dots [H, B]_- \dots]_-]_+ \rangle \quad (4.5)$$

Die Gesamtzahl der Kommutatoren innerhalb des Antikommutators muss dabei genau  $n$  betragen. Diese Beziehung ist sehr nützlich, da dadurch die Momente bei vorgegebenem Hamilton-Operator im Prinzip bis zu beliebiger Ordnung *exakt* berechnet werden können. Bei der Darstellung (4.4) der Spektralmomente muss man hingegen die Spektraldichte kennen, um dies zu erreichen. In der Praxis muss man sich allerdings üblicherweise auf die niedrigsten Momente beschränken, da der Rechenaufwand mit steigendem  $n$  sehr schnell zunimmt. Für die Herleitung der NSDA werden beispielsweise die ersten vier Momente des rechten Ferromagneten benötigt. Durch Vergleich der exakt berechneten Momente mit dem ersten Ausdruck (4.4) kann die verwendete Näherung für die Spektraldichte getestet werden, da sie als umso besser angesehen werden kann, je mehr Momente

sie korrekt reproduziert.

Der Zusammenhang zwischen Greenfunktion, Spektraldichte und Spektralmomenten wird durch die Spektraldarstellung der Greenfunktion hergestellt, die auch im Nichtgleichgewicht ihre Gültigkeit behält, wie in Anhang .5 bewiesen wird. Damit kann die Greenfunktion auf folgende Weise umgeschrieben werden:

$$\begin{aligned}
 G_{\mathbf{k}_R\sigma}(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{S_{\mathbf{k}_R\sigma}(E')}{E - E'} \\
 &= \frac{1}{E} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{S_{\mathbf{k}_R\sigma}(E')}{1 - \frac{E'}{E}} \\
 &= \frac{1}{E} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \left( \frac{E'}{E} \right)^n S_{\mathbf{k}_R\sigma}(E') \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(n)}}{E^{n+1}}
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

wobei im letzten Schritt die Definition der Spektralmomente (4.4) verwendet wurde. Die NSDA wird so konstruiert, dass ihre Spektraldichte die ersten vier Momente korrekt reproduziert. Im Fall hoher Energien  $E$  kann man sich auf die ersten Terme der obigen Entwicklung beschränken. Der Ansatz stellt somit sicher, dass die Greenfunktion das richtige Hochenergieverhalten zeigt.

Diese Entwicklung der Greenfunktion kann nun in die Dyson-Gleichung des rechten Ferromagneten (vgl. Gl. (3.50))

$$EG_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) = 1 + \left( \epsilon_{\mathbf{k}_R} + \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) + \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) \right) G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) \tag{4.7}$$

eingesetzt werden. Zunächst müssen dazu neben der Greenfunktion (4.6) auch noch die beiden Selbstenergien nach der Energie entwickelt werden. Ihre Entwicklungen sind durch Koeffizienten  $C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(m)}$  und  $D_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(m)}$  charakterisiert:

$$\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(m)}}{E^m} \tag{4.8}$$

$$\Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{D_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(m)}}{E^m} \tag{4.9}$$

Da die Tunnelselbstenergie im Wesentlichen aus zwei Greenfunktionen besteht, können die  $D_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(m)}$  auf die Momente der bereits berechneten Greenfunktionen des Isolators bzw. des Paramagneten zurückgeführt werden. Die  $C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(m)}$  legen die Wechselwirkungsselbstenergie fest und sind somit die gesuchten Größen.

#### 4 Nichtgleichgewichtsspektraldichteansatz

Einsetzen dieser Beziehungen in die Dyson-Gleichung führt auf:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(n)}}{E^n} = 1 + \epsilon_{\mathbf{k}_R} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(n)}}{E^{n+1}} + \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(m)} M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(n)}}{E^{m+n+1}} + \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{D_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(m)} M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(n)}}{E^{m+n+1}} \quad (4.10)$$

Da die Spektralmomente selbst nicht energieabhängig sind, kann diese Gleichung nur dann erfüllt sein, wenn die Vorfaktoren zu den  $1/E$ -Potenzen auf der linken und rechten Seite in jeder Ordnung identisch sind. Ein Vergleich dieser Koeffizienten bis zur Ordnung  $(1/E)^3$  und anschließendes Umformen nach den unbekannten  $C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(m)}$  führt auf folgendes Gleichungssystem:

$$C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)} = \frac{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)}}{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)}} - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - D_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)} \quad (4.11)$$

$$C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)} = \frac{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(2)}}{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)}} - \left( \frac{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)}}{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)}} \right)^2 - D_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)} \quad (4.12)$$

$$C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(2)} = \frac{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(3)}}{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)}} - 2 \frac{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)} M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(2)}}{(M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)})^2} + \left( \frac{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)}}{M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)}} \right)^3 - D_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(2)} \quad (4.13)$$

Zur Lösung dieses Systems werden somit die ersten vier Momente des rechten Ferromagneten und die ersten drei Momente der Tunnelselbstenergie benötigt. Diese werden in den nächsten Abschnitten dieses Kapitels abgeleitet. Allerdings können auch ohne ihre explizite Kenntnis bereits einige wichtige Aussagen zur Selbstenergie getroffen werden. Offenbar sind die Spektralmomente alle reell, wodurch auch die Koeffizienten  $C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(m)}$  und somit die gesamte Selbstenergie  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E)$  ebenfalls reell sein werden. Die avancierten und retardierten Wechselwirkungsselbstenergien stimmen also überein,  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) = \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^a(E)$ . Zur Berechnung der kleineren Greenfunktion des rechten Ferromagneten wird neben der retardierten auch die kleinere Wechselwirkungsselbstenergie benötigt. Sie müsste im Prinzip ebenfalls im Rahmen einer Hochenergieentwicklung bestimmt werden. Dies ist aber nicht ohne weiteres möglich, da im Gegensatz zur retardierten Greenfunktion kein einfacher Zusammenhang mit den Spektralmomenten besteht. Zur näherungsweisen Bestimmung von  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E)$  bietet sich jedoch die in Abschnitt 2.4 diskutierte Annahme von Ng an. Dort wurde der Ausdruck

$$\Omega^< = \Omega_0^< (\Omega_0^r - \Omega_0^a)^{-1} (\Omega^r - \Omega^a) \quad (4.14)$$

für die kleinere Selbstenergie gefunden. Dabei bezeichnet  $\Omega$  die gesamte Selbstenergie des Systems, in diesem Fall also die Summe aus Tunnel- und Wechselwirkungsselbstenergie,  $\Omega \equiv \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma} + \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}$ . Größen, die mit dem Index „0“ versehen wurden, sind ohne Wechselwirkung, d.h. im Grenzfall  $U_R \rightarrow 0$ , zu berechnen. Daher gilt  $\Omega_0 = \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}$ , da die Wechselwirkungsselbstenergie in diesem Fall offensichtlich verschwinden muss. Aus der



## 4.2 Berechnung der ersten vier Momente des rechten Ferromagneten

obigen Gleichung ergibt sich somit:

$$\begin{aligned}\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^< + \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^< &= \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^< (\Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^r - \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^a)^{-1} (\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r + \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^r - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^a - \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^a) \\ &= \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^<\end{aligned}\quad (4.15)$$

Im letzten Schritt wurde ausgenutzt, dass die Wechselwirkungsselbstenergie reell ist und daher  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r = \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^a$  gilt. Insgesamt folgt, dass die kleinere Wechselwirkungsselbstenergie im Rahmen des Ng-Ansatzes verschwindet,  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^< \equiv 0$ , und daher bei der Berechnung der kleineren Greenfunktion nicht berücksichtigt werden muss. Dies gilt übrigens für alle reellen Selbstenergien, nicht nur für die NSDA. Die Keldysh-Gleichung lautet in diesem Fall somit:

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) = G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) G_{\mathbf{k}_R\sigma}^a(E) \quad (4.16)$$

Diese vereinfachte Form wird bei der Ableitung der NSDA mehrfach benutzt werden. In Abschnitt 3.4 wurde gezeigt, dass jede Wechselwirkungsselbstenergie die Beziehung (3.70)

$$\sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \operatorname{Re} \left( \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) G_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) + \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) G_{\mathbf{k}_R\sigma}^a(E) \right) = 0 \quad (4.17)$$

erfüllen muss, um Strom- und Teilchenzahlerhaltung sicherzustellen. Wegen  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^< = 0$  fällt der zweite Term offensichtlich weg. Auch der erste Term ist immer Null, da  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r$  reell und die kleinere Greenfunktion rein imaginär sind. Der Realteil des Produkts aus beiden verschwindet somit. Die NSDA-Selbstenergie erfüllt also die obige Gleichung und kann daher im Rahmen der vorgestellten Theorie zur Beschreibung der Wechselwirkung verwendet werden.

## 4.2 Berechnung der ersten vier Momente des rechten Ferromagneten

Der nächste Schritt zur Bestimmung der Wechselwirkungsselbstenergie besteht in der Berechnung der Momente. Dazu werden in der Darstellung (4.5) die Operatoren  $A$  und  $B$  durch die Elektronenkonstruktionsoperatoren im rechten Ferromagneten ersetzt, so dass sich nach Fouriertransformation der folgende Ausdruck ergibt:

$$M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(n)} = \frac{1}{N} \sum_{i_R j_R} e^{-i\mathbf{k}_R \cdot (\mathbf{R}_{i_R} - \mathbf{R}_{j_R})} \left\langle [[\dots [c_{i_R\sigma}, H] - \dots, H]_-, [H \dots [H, c_{j_R\sigma}^+] - \dots]_-]_+ \right\rangle \quad (4.18)$$

wobei wiederum genau  $n$  Kommutatoren innerhalb des Antikommutators stehen. Dabei spielt es keine Rolle, wie diese Kommutatoren verteilt sind, d.h. ob beispielsweise  $c_{i_R\sigma}$   $n$ -mal mit  $H$  kommutiert wird und  $c_{j_R\sigma}^+$  gar nicht oder umgekehrt. Meistens ist es aber von Vorteil, die Kommutatoren so zu verteilen, dass nur eine möglichst niedrige Zahl zu berechnen ist, also jeweils etwa  $n/2$ . Die Ergebnisse aller (Anti-)Kommutatoren, die in diesem Abschnitt benötigt werden, sind in Anhang 6 angegeben.

Die Berechnung des nullten Moments ist praktisch trivial, da kein Kommutator vor-

#### 4 Nichtgleichgewichtsspektraldichteansatz

kommt und lediglich der Antikommutator von zwei Elektronenkonstruktionsoperatoren zu berechnen ist:

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)} &= \frac{1}{N} \sum_{i_R j_R} e^{-i\mathbf{k}_R \cdot (\mathbf{R}_{i_R} - \mathbf{R}_{j_R})} \underbrace{\langle [c_{i_R\sigma}, c_{j_R\sigma}^\dagger]_+ \rangle}_{=\delta_{i_R j_R}} \\ &= 1 \end{aligned} \quad (4.19)$$

Das nullte Moment ist identisch zum Normierungsintegral der Spektraldichte

$$M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} dE S_{\mathbf{k}_R\sigma}(E), \quad (4.20)$$

die somit auf Eins normiert sein muss.

Zur Berechnung des ersten Moments gibt es zwei Möglichkeiten, den Kommutator zu verteilen. Wird er mit dem Vernichtungsoperator gebildet, ergibt sich folgende Darstellung des Moments:

$$M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_{i_R j_R} e^{-i\mathbf{k}_R \cdot (\mathbf{R}_{i_R} - \mathbf{R}_{j_R})} \left\langle [[c_{i_R\sigma}, H]_-, c_{j_R\sigma}^\dagger]_+ \right\rangle \quad (4.21)$$

Mit Hilfe des inneren Kommutators (.8) und der Tatsache, dass Operatoren aus verschiedenen Regionen jeweils antikommutieren, folgt für den Antikommutator das Ergebnis (.18). Insgesamt gilt somit für das erste Moment:

$$M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)} = \epsilon_{\mathbf{k}_R} + U_R \langle n_{R,-\sigma} \rangle \quad (4.22)$$

Hierbei wurde Translationssymmetrie angenommen, wodurch die mittlere Teilchenzahl nicht länger vom Gitterplatz abhängig ist. Dadurch kann der Ortsindex weggelassen werden, d.h. es gilt  $\langle n_{i_R\sigma} \rangle \equiv \langle n_{R,\sigma} \rangle$ . Um die physikalische Bedeutung des ersten Moments zu erkennen, wird der Ausdruck

$$M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} dE E S_{\mathbf{k}_R\sigma}(E) \quad (4.23)$$

über alle Wellenzahlen  $\mathbf{k}_R$  gemittelt:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_R} M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE E S_{\mathbf{k}_R\sigma}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE E \rho_{R\sigma}(E) \quad (4.24)$$

Dabei ist  $\rho_{R\sigma}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_R} S_{\mathbf{k}_R\sigma}(E)$  die spinabhängige Zustandsdichte des rechten Ferromagneten. Der Term auf der rechten Seite der Gleichung entspricht dem Schwerpunkt des Energiespektrums, der wegen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE E \rho_{R\sigma}(E) \stackrel{!}{=} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_R} \epsilon_{\mathbf{k}_R} + U_R \langle n_{R,-\sigma} \rangle = T_{0,R} + U_R \langle n_{R,-\sigma} \rangle \quad (4.25)$$

## 4.2 Berechnung der ersten vier Momente des rechten Ferromagneten

ebenfalls spinabhängig sein wird und für endliche Bandbesetzungen nicht mehr mit dem Schwerpunkt  $T_{0,R}$  des freien Bands übereinstimmt. Der zusätzlich auftretende Term  $U_R \langle n_{R,-\sigma} \rangle$  ist mit der Mean Field-Selbstenergie identisch, d.h. die Mean Field-Näherung wird das erste Moment offenbar korrekt reproduzieren.

Für das zweite Moment gilt:

$$M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(2)} = \frac{1}{N} \sum_{i_R j_R} e^{-i\mathbf{k}_R \cdot (\mathbf{R}_{i_R} - \mathbf{R}_{j_R})} \left\langle \left[ [c_{i_R\sigma}, H]_-, [H, c_{j_R\sigma}^+]_- \right]_+ \right\rangle \quad (4.26)$$

Dabei wurden die Kommutatoren so verteilt, dass ihre Ordnung möglichst niedrig bleibt. Mit (.21) folgt nach Mittelung und Fouriertransformation für das Moment:

$$M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(2)} = \epsilon_{\mathbf{k}_R}^2 + 2U_R \epsilon_{\mathbf{k}_R} \langle n_{R,-\sigma} \rangle + U_R^2 \langle n_{R,-\sigma} \rangle + \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} \quad (4.27)$$

Erst im zweiten Moment ist somit der Einfluss der Hybridisierung erkennbar. Die ersten beiden Momente waren mit den Gleichgewichtsmomenten identisch [105]. Im Gegensatz zu diesen hat es auch keine unmittelbare physikalische Interpretation mehr.

Bisher war die Berechnung der Momente relativ leicht durchzuführen. Die Berechnung des dritten Moments wird nun aber deutlich aufwändiger. Es wird die folgende Verteilung der Kommutatoren verwendet:

$$M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(3)} = \frac{1}{N} \sum_{i_R j_R} e^{-i\mathbf{k}_R \cdot (\mathbf{R}_{i_R} - \mathbf{R}_{j_R})} \left\langle \left[ [[c_{i_R\sigma}, H]_-, H]_-, [H, c_{j_R\sigma}^+]_- \right]_+ \right\rangle \quad (4.28)$$

Der Antikommutator wird in Anhang .4 abgeleitet. Setzt man das Ergebnis (.23) mit den Abkürzungen (.24) bis (.27) in die obige Definition des Moments ein, führt die Fouriertransformation aus und nimmt Translationssymmetrie an, ergibt sich der folgende Ausdruck für das dritte Moment:

$$M_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(3)} = \tilde{A}_0 + U_R \tilde{A}_1 + U_R^2 \tilde{A}_2 + U_R^3 \langle n_{R,-\sigma} \rangle \quad (4.29)$$

mit

$$\tilde{A}_0 = \epsilon_{\mathbf{k}_R}^3 + \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} \left( 2\epsilon_{\mathbf{k}_R} \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} + \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} \right) \quad (4.30)$$

$$\tilde{A}_1 = 3\epsilon_{\mathbf{k}_R}^2 \langle n_{R,-\sigma} \rangle + 2 \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} \langle n_{R,-\sigma} \rangle + B_{1,-\sigma}(\mathbf{k}_R) \quad (4.31)$$

$$\tilde{A}_2 = \left( (2 + \langle n_{R,-\sigma} \rangle) \epsilon_{\mathbf{k}_R} + T_{0,R} \right) \langle n_{R,-\sigma} \rangle + B_{S,-\sigma} + B_{T,-\sigma} + B_{W,-\sigma}(\mathbf{k}_R) \quad (4.32)$$

wobei zusätzlich die sogenannten Bandkorrekturen definiert wurden:

$$B_{1,-\sigma}(\mathbf{k}_R) = \frac{1}{N} \sum_{X=I,P} \sum_{i_R j_R i_X} e^{-i\mathbf{k}_R \cdot (\mathbf{R}_{i_R} - \mathbf{R}_{j_R})} T_{i_R j_R} \times \\ \times \left( T_{i_R i_X} \langle c_{i_R-\sigma}^+ d_{i_X-\sigma} \rangle - T_{i_X i_R} \langle d_{i_X-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} \rangle \right) \quad (4.33)$$

$$B_{S,-\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{i_R j_R} T_{i_R j_R} \langle c_{i_R-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} (2n_{i_R\sigma} - 1) \rangle \quad (4.34)$$

$$B_{T,-\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{X=I,P} \sum_{i_R i_X} T_{i_X i_R} \langle d_{i_X-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} (2n_{i_R\sigma} - 1) \rangle \quad (4.35)$$

$$B_{W,-\sigma}(\mathbf{k}_R) = \frac{1}{N} \sum_{i_R j_R} T_{i_R j_R} e^{-i\mathbf{k}_R \cdot (\mathbf{R}_{i_R} - \mathbf{R}_{j_R})} \left( \langle n_{i_R-\sigma} n_{j_R-\sigma} \rangle - \langle n_{R,-\sigma} \rangle^2 - \right. \\ \left. - \langle c_{j_R\sigma}^+ c_{j_R-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} c_{i_R\sigma} \rangle - \langle c_{j_R\sigma}^+ c_{i_R-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} c_{i_R\sigma} \rangle \right) \quad (4.36)$$

Damit ist das dritte Moment bis auf die obigen Bandkorrekturen bestimmt. Die darin auftretenden Korrelationsfunktionen sind im Rahmen des Keldysh-Formalismus zu berechnen, was Inhalt des nächsten Abschnitts sein wird.

### 4.3 Berechnung der Bandkorrekturen

Von den vier Bandkorrekturen gestaltet sich die Berechnung von  $B_{1,-\sigma}(\mathbf{k}_R)$  noch am einfachsten, da es sich relativ leicht durch eine bereits bekannte Größe ausdrücken lässt. Nach dem Ausführen der Fouriertransformation (vgl. Anhang .6) gilt nämlich:

$$B_{1,-\sigma}(\mathbf{k}_R) = \frac{1}{N} \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R} \left( \epsilon_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} \langle c_{\mathbf{q}_R-\sigma}^+ d_{\mathbf{k}_X-\sigma} \rangle - \right. \\ \left. - \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{q}_R} \langle d_{\mathbf{k}_X-\sigma}^+ c_{\mathbf{q}_R-\sigma} \rangle \right) \\ = \frac{2i}{N} \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R} \text{Im} \left( \epsilon_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} \langle c_{\mathbf{q}_R-\sigma}^+ d_{\mathbf{k}_X-\sigma} \rangle \right) \\ \stackrel{(2.30)}{=} -\frac{2i}{N} \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R} \text{Re} \left( \epsilon_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} G_{\mathbf{k}_X \mathbf{q}_R-\sigma}^< \right) \\ \stackrel{(3.63)}{=} \frac{i}{N} \epsilon_{\mathbf{k}_R} \langle \dot{N}_R^{-\sigma} \rangle \\ \equiv 0 \quad (4.37)$$

Im letzten Schritt wurde ausgenutzt, dass es sich um eine stationäre Theorie handelt, wodurch die Teilchenzahl nicht zeitabhängig sein kann. Dieser Aspekt wurde bereits bei der Ableitung des Tunnelstroms in Abschnitt 3.4 diskutiert. Somit ist die Bandkorrektur  $B_{1,-\sigma}(\mathbf{k}_R)$  im stationären Fall vernachlässigbar.

$B_{W,-\sigma}(\mathbf{k}_R)$  besteht aus mehreren höheren Korrelationsfunktionen und ist zusätzlich über

die Exponentialfunktion noch wellenzahlabhängig. Damit ist die Berechnung dieses Faktors eine anspruchsvolle Aufgabe. Sie wird aber dadurch vereinfacht, dass man sich relativ schnell klarmachen kann, dass  $B_{W,-\sigma}(\mathbf{k}_R)$  zumindest auf Mean Field-Niveau spinunabhängig ist und somit für die Behandlung des Magnetismus als eher zweitrangig anzusehen ist [120]. In Mean Field-Näherung gilt nämlich  $\langle n_{i_R-\sigma} n_{j_R-\sigma} \rangle \stackrel{\text{MF}}{=} \langle n_{R,-\sigma} \rangle \langle n_{R,-\sigma} \rangle$  und die ersten beiden Terme von  $B_{W,-\sigma}(\mathbf{k}_R)$  heben sich gegenseitig weg. Die beiden verbleibenden Ausdrücke lassen sich so umformen, dass man ihre Spinunabhängigkeit direkt erkennt. Durch Vertauschen der Operatoren ergibt sich für den ersten Term:

$$\langle c_{j_R\sigma}^+ c_{j_R-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} c_{i_R\sigma} \rangle = \langle c_{j_R-\sigma}^+ c_{j_R\sigma}^+ c_{i_R\sigma} c_{i_R-\sigma} \rangle \quad (4.38)$$

Damit liefert dieser Term sowohl für  $\sigma = \uparrow$  als auch für  $\sigma = \downarrow$  denselben Beitrag. Auf ähnliche Weise zeigt man dies für den letzten Term:

$$\begin{aligned} \langle c_{j_R\sigma}^+ c_{i_R-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} c_{i_R\sigma} \rangle &= \langle (c_{j_R\sigma}^+ c_{i_R-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} c_{i_R\sigma})^+ \rangle \\ &= \langle c_{i_R\sigma}^+ c_{j_R-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} c_{j_R\sigma} \rangle \\ &= \langle c_{j_R-\sigma}^+ c_{i_R\sigma}^+ c_{j_R\sigma} c_{i_R-\sigma} \rangle \end{aligned} \quad (4.39)$$

Im ersten Schritt wurde benutzt, dass der Erwartungswert eine reelle Größe ist. Man könnte  $B_{W,-\sigma}(\mathbf{k}_R)$  somit vernachlässigen, ohne allzu große Änderungen des Magnetisierungsverhaltens befürchten zu müssen. Als etwas fortgeschrittenere Näherung soll der Term in dieser Arbeit aber nicht komplett vernachlässigt werden, sondern lediglich in seiner über alle Wellenzahlen gemittelten Form berücksichtigt werden. Dadurch wird  $B_{W,-\sigma}(\mathbf{k}_R)$  nämlich zu einer lokalen Größe:

$$\begin{aligned} B_{W,-\sigma} &\equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_R} B_{W,-\sigma}(\mathbf{k}_R) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i_R j_R} T_{i_R j_R} \underbrace{\left( \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_R} e^{-i\mathbf{k}_R \cdot (\mathbf{R}_{i_R} - \mathbf{R}_{j_R})} \right)}_{=\delta_{i_R j_R}} \left\{ \langle n_{i_R-\sigma} n_{j_R-\sigma} \rangle - \right. \\ &\quad \left. - \langle n_{R,-\sigma} \rangle^2 - \langle c_{j_R\sigma}^+ c_{i_R-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} c_{i_R\sigma} \rangle - \langle c_{j_R\sigma}^+ c_{j_R-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} c_{i_R\sigma} \rangle \right\} \\ &= T_{0,R} \{ \langle n_{R,-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{R,-\sigma} \rangle) - 2 \langle n_{i_R-\sigma} n_{i_R\sigma} \rangle \} \end{aligned} \quad (4.40)$$

Dabei konnte die Tatsache verwendet werden, dass für Fermionen aufgrund des Pauli-Prinzips immer  $n_{i_R\sigma}^2 = n_{i_R\sigma}$  gilt. Der letzte Term ist darüberhinaus wegen der Annahme der Translationssymmetrie nur formal vom Gitterplatz  $\mathbf{R}_{i_R}$  abhängig.

Offenbar ist  $B_{W,-\sigma}$  nach der Mittelung doch spinabhängig. Daher gilt der obige „Beweis“ der Spinunabhängigkeit tatsächlich nur auf Mean Field-Niveau. Eine genauere Untersuchung des Einflusses von  $B_{W,-\sigma}(\mathbf{k}_R)$  hat jedoch gezeigt, dass die Nichtlokalität lediglich im Fall eines einfach kubischen (sc) Gitters einen deutlichen Einfluss auf das Magnetisierungsverhalten hat [120]. Für das in dieser Arbeit betrachtete bcc-Gitter ist sie hingegen vernachlässigbar.

#### 4 Nichtgleichgewichtsspektraldichteansatz

Eine weitere unbekannte Größe, die bei der Berechnung des dritten Moments auftrat, war  $B_{S,-\sigma}$ . Sie besteht im Wesentlichen aus zwei Korrelationsfunktionen:

$$B_{S,-\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{i_R j_R} T_{i_R j_R} \langle c_{i_R-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} (2n_{i_R\sigma} - 1) \rangle \quad (4.41)$$

Diese Bandkorrektur wird sich als entscheidend für das Auftreten von spontanem Magnetismus erweisen. Für  $i_R = j_R$  erkennt man recht schnell eine deutliche Ähnlichkeit zwischen diesem Ausdruck und  $B_{W,-\sigma}$ . Es bietet sich daher an, beide zusammenzufassen. Als abkürzende Schreibweise wird  $B_{SW,-\sigma}$  für die Summe der beiden Bandkorrekturen benutzt:

$$\begin{aligned} B_{SW,-\sigma} &\equiv B_{S,-\sigma} + B_{W,-\sigma} \\ &= -T_{0,R} \langle n_{R,-\sigma} \rangle^2 + \frac{1}{N} \sum_{i_R j_R}^{i_R \neq j_R} T_{i_R j_R} \langle c_{i_R-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} (2n_{i_R\sigma} - 1) \rangle \\ &= -T_{0,R} \langle n_{R,-\sigma} \rangle^2 + \frac{1}{N} \sum_{i_R j_R} (T_{i_R j_R} - T_{0,R}) \langle c_{i_R-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} (2n_{i_R\sigma} - 1) \rangle \end{aligned} \quad (4.42)$$

Es ist möglich, die höhere Korrelationsfunktion  $\langle c_{i_R-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} n_{i_R\sigma} \rangle$  allein durch eine Ein-  
teilchen-Greenfunktion auszudrücken. Dazu multipliziert man

$$[H, c_{i_R-\sigma}^+]_- = \sum_{l_R} T_{l_R i_R} c_{l_R-\sigma}^+ + U_R n_{i_R\sigma} c_{i_R-\sigma}^+ + \sum_{X=I,P} \sum_{i_X} T_{i_X i_R} d_{i_X-\sigma}^+ \quad (4.43)$$

von rechts mit  $c_{j_R-\sigma}$  und mittelt anschließend:

$$\begin{aligned} \langle [H, c_{i_R-\sigma}^+]_- c_{j_R-\sigma} \rangle &= \sum_{l_R} T_{l_R i_R} \langle c_{l_R-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} \rangle + U_R \langle n_{i_R\sigma} c_{i_R-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} \rangle + \\ &\quad + \sum_{X=I,P} \sum_{i_X} T_{i_X i_R} \langle d_{i_X-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} \rangle \end{aligned} \quad (4.44)$$

Dabei tritt auf der rechten Seite, bis auf eine triviale Vertauschung von Operatoren, gerade die interessierende höhere Korrelationsfunktion auf. Unter Ausnutzung der Heisenberg-Bewegungsgleichung [71]

$$-i \frac{\partial}{\partial t} c_{i_R-\sigma}^+(t) = [H, c_{i_R-\sigma}^+]_-(t) \quad (4.45)$$

lässt sich die linke Seite weiter umformen:

$$\begin{aligned}
 \langle [H, c_{i_R-\sigma}^+]_-(t) c_{j_R-\sigma}(t') \rangle &= -i \frac{\partial}{\partial t} \langle c_{i_R-\sigma}^+(t) c_{j_R-\sigma}(t') \rangle \\
 &= -\frac{\partial}{\partial t} G_{j_R i_R-\sigma}^<(t', t) \\
 &= -\frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} dE G_{j_R i_R-\sigma}^<(E) e^{-iE(t'-t)} \\
 &= -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE E G_{j_R i_R-\sigma}^<(E) e^{-iE(t'-t)} \quad (4.46)
 \end{aligned}$$

Im dritten Schritt wurde auf die übliche Weise von Zeit- auf Energieabhängigkeit fouriertransformiert. Die beiden restlichen Korrelationsfunktionen in Gl. (4.44) lassen sich nach Fouriertransformation ebenfalls durch kleinere Greenfunktionen ausdrücken:

$$\langle c_{l_R-\sigma}^+(t) c_{j_R-\sigma}(t') \rangle = -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE G_{j_R l_R-\sigma}^<(E) e^{-iE(t'-t)} \quad (4.47)$$

$$\langle d_{i_X-\sigma}^+(t) c_{j_R-\sigma}(t') \rangle = -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE G_{j_R i_X-\sigma}^<(E) e^{-iE(t'-t)} \quad (4.48)$$

Setzt man diese Ausdrücke für  $t = t'$  in Gl. (4.44) ein, so führt dies auf eine Bestimmungsgleichung für die gesuchte höhere Korrelationsfunktion:

$$\begin{aligned}
 \langle n_{i_R\sigma} c_{i_R-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} \rangle &= \frac{i}{2\pi U_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ -E G_{j_R i_R-\sigma}^<(E) + \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{l_R} T_{l_R i_R} G_{j_R l_R-\sigma}^<(E) + \sum_{X=I,P} \sum_{i_X} T_{i_X i_R} G_{j_R i_X-\sigma}^<(E) \right] \quad (4.49)
 \end{aligned}$$

Die rechte Seite wird nun noch auf Wellenzahlen transformiert:

$$\begin{aligned}
 \langle n_{i_R\sigma} c_{i_R-\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} \rangle &= \frac{i}{2\pi N U_R} \sum_{\mathbf{k}_R} e^{i\mathbf{k}_R \cdot (\mathbf{R}_{j_R} - \mathbf{R}_{i_R})} \times \\
 &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ (-E + \epsilon_{\mathbf{k}_R}) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) + \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X-\sigma}^<(E) \right] \quad (4.50)
 \end{aligned}$$

Die gemischten kleineren Greenfunktionen  $G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X-\sigma}^<(E)$  sind in ähnlicher Form bereits bei der Stromberechnung in Abschnitt 3.4 aufgetreten. Dort wurde der Ausdruck (3.64) für die NEGF gezeigt, der sich unter Verwendung der Diagonalannahme  $\Delta_{\mathbf{k}_R \mathbf{q}_R \sigma} \stackrel{!}{=} \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma} \delta_{\mathbf{k}_R \mathbf{q}_R}$  folgendermaßen schreiben lässt:

$$\sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} G_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R \sigma} = \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma} G_{\mathbf{k}_R \sigma} \quad (4.51)$$

#### 4 Nichtgleichgewichtsspektraldichteansatz

Aus Symmetriegründen gilt daher ebenfalls:

$$\sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} = G_{\mathbf{k}_R \sigma} \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma} \quad (4.52)$$

Durch analytische Fortsetzung erhält man daraus die avancierten und kleineren Komponenten der gemischten Greenfunktion:

$$\sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X \sigma}^a \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} = G_{\mathbf{k}_R \sigma}^a \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^a \quad (4.53)$$

$$\sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X \sigma}^< \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} = G_{\mathbf{k}_R \sigma}^r \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^< + G_{\mathbf{k}_R \sigma}^< \Delta_{\mathbf{k}_R \sigma}^a \quad (4.54)$$

Erstere wird bei der Berechnung von  $B_{T,-\sigma}$  eine Rolle spielen und wurde daher ebenfalls mit angegeben. Mit Hilfe des Ausdrucks für die kleinere Komponente und der Keldysh-Gleichung (4.16) kann der Integralkern der höheren Korrelationsfunktion (4.50) folgendermaßen umgeformt werden:

$$\begin{aligned} & \left[ (-E + \epsilon_{\mathbf{k}_R}) G_{\mathbf{k}_R - \sigma}^< + \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X - \sigma}^< \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} \right] = \\ & = \left( -E + \epsilon_{\mathbf{k}_R} + \Delta_{\mathbf{k}_R - \sigma}^a \right) G_{\mathbf{k}_R - \sigma}^< + G_{\mathbf{k}_R - \sigma}^r \Delta_{\mathbf{k}_R - \sigma}^< G_{\mathbf{k}_R - \sigma}^a (G_{\mathbf{k}_R - \sigma}^a)^{-1} \\ & \stackrel{(4.16)}{=} \left( -E + \epsilon_{\mathbf{k}_R} + \Delta_{\mathbf{k}_R - \sigma}^a + \left( G_{\mathbf{k}_R - \sigma}^a \right)^{-1} \right) G_{\mathbf{k}_R - \sigma}^< \\ & \stackrel{(3.44)}{=} \left( -E + \epsilon_{\mathbf{k}_R} + \Delta_{\mathbf{k}_R - \sigma}^a + E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R - \sigma}^a - \Delta_{\mathbf{k}_R - \sigma}^a \right) G_{\mathbf{k}_R - \sigma}^< \\ & = -\Sigma_{\mathbf{k}_R - \sigma}^a G_{\mathbf{k}_R - \sigma}^< \end{aligned} \quad (4.55)$$

Somit ergibt sich letztendlich der folgende Ausdruck für die höhere Korrelationsfunktion

$$\langle n_{i_R \sigma} c_{i_R - \sigma}^+ c_{j_R - \sigma} \rangle = -\frac{i}{2\pi N U_R} \sum_{\mathbf{k}_R} e^{i\mathbf{k}_R \cdot (\mathbf{R}_{j_R} - \mathbf{R}_{i_R})} \int_{-\infty}^{\infty} dE \Sigma_{\mathbf{k}_R - \sigma}^a(E) G_{\mathbf{k}_R - \sigma}^<(E), \quad (4.56)$$

der nun noch in  $B_{SW,-\sigma}$  eingesetzt werden muss:

$$\begin{aligned} B_{SW,-\sigma} &= -T_{0,R} \langle n_{R,-\sigma} \rangle^2 - \frac{i}{2\pi N} \sum_{\mathbf{k}_R} (\epsilon_{\mathbf{k}_R} - T_{0,R}) \times \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ \left( \frac{2}{U_R} \Sigma_{\mathbf{k}_R - \sigma}^a(E) - 1 \right) G_{\mathbf{k}_R - \sigma}^<(E) \right] \end{aligned} \quad (4.57)$$

Die letzte verbleibende Bandkorrektur ist  $B_{T,-\sigma}$ . Ihre Definition

$$B_{T,-\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{X=I,P} \sum_{i_R i_X} T_{i_X i_R} \langle d_{i_X - \sigma}^+ c_{i_R - \sigma} (2n_{i_R \sigma} - 1) \rangle \quad (4.58)$$



### 4.3 Berechnung der Bandkorrekturen

ist strukturell sehr ähnlich zu  $B_{S,-\sigma}$ . Daher verläuft auch die Berechnung der dabei auftretenden höheren Korrelationsfunktion analog. Man multipliziert also zunächst

$$[c_{i_R-\sigma}, H]_- = \sum_{l_R} T_{i_R l_R} c_{l_R-\sigma} + U_R c_{i_R-\sigma} n_{i_R\sigma} + \sum_{A=I,P} \sum_{j_A} T_{i_R j_A} d_{j_A-\sigma} \quad (4.59)$$

von links mit  $d_{i_X-\sigma}^+$  und mittelt anschließend:

$$\begin{aligned} \langle d_{i_X-\sigma}^+ [c_{i_R-\sigma}, H]_- \rangle &= \sum_{l_R} T_{i_R l_R} \langle d_{i_X-\sigma}^+ c_{l_R-\sigma} \rangle + U_R \langle d_{i_X-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} n_{i_R\sigma} \rangle + \\ &+ \sum_{A=I,P} \sum_{j_A} T_{i_R j_A} \langle d_{i_X-\sigma}^+ d_{j_A-\sigma} \rangle \end{aligned} \quad (4.60)$$

Der Kommutator auf der linken Seite lässt sich wiederum mit Hilfe der Heisenberg-Bewegungsgleichung auf einen einzelnen Operator  $c_{i_R-\sigma}$  reduzieren und die beiden Einteilchen-Korrelationsfunktionen auf der rechten Seite sind bis auf einen trivialen Vorfaktor identisch zu kleineren Greenfunktionen. Nach Fouriertransformation von Zeit auf Energie gilt:

$$\langle d_{i_X-\sigma}^+(t) [c_{i_R-\sigma}, H]_-(t') \rangle = -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE EG_{i_R i_X-\sigma}^<(E) e^{-iE(t'-t)} \quad (4.61)$$

$$\langle d_{i_X-\sigma}^+(t) c_{l_R-\sigma}(t') \rangle = -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE G_{l_R i_X-\sigma}^<(E) e^{-iE(t'-t)} \quad (4.62)$$

$$\langle d_{i_X-\sigma}^+(t) d_{j_A-\sigma}(t') \rangle = -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE G_{j_A i_X-\sigma}^<(E) e^{-iE(t'-t)} \quad (4.63)$$

Für die höhere Korrelationsfunktion folgt für  $t = t'$  somit:

$$\begin{aligned} U_R \langle d_{i_X-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} n_{i_R\sigma} \rangle &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ -EG_{i_R i_X-\sigma}^<(E) + \sum_{l_R} T_{i_R l_R} G_{l_R i_X-\sigma}^<(E) + \right. \\ &+ \left. \sum_{A=I,P} \sum_{j_A} T_{i_R j_A} G_{j_A i_X-\sigma}^<(E) \right] \\ &= \frac{i}{2\pi N} \sum_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{i(\mathbf{k}_R \cdot \mathbf{R}_{i_R} - \mathbf{k}_X \cdot \mathbf{R}_{i_X})} \left[ (-E + \epsilon_{\mathbf{k}_R}) G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X-\sigma}^<(E) + \right. \\ &+ \left. \sum_{A=I,P} \sum_{\mathbf{k}_A} \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_A} G_{\mathbf{k}_A \mathbf{k}_X-\sigma}^<(E) \right] \end{aligned} \quad (4.64)$$

Im zweiten Schritt wurde auf Wellenzahlen transformiert. Der letzte Term im Integranden kann durch eine weitere gemischte Greenfunktion und die Tunnelselbstenergie ausgedrückt werden. Analog zu Gl. (4.54) gilt:

$$\sum_{A=I,P} \sum_{\mathbf{k}_A} \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_A} G_{\mathbf{k}_A \mathbf{k}_X-\sigma}^< = \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X-\sigma}^< + \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X-\sigma}^a \quad (4.65)$$

#### 4 Nichtgleichgewichtsspektraldichteansatz

Setzt man diesen Ausdruck in die höhere Korrelationsfunktion (4.64) ein, so folgt:

$$\begin{aligned} \langle d_{i_X-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} n_{i_R\sigma} \rangle &= \frac{i}{2\pi N U_R} \sum_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{i(\mathbf{k}_R \cdot \mathbf{R}_{i_R} - \mathbf{k}_X \cdot \mathbf{R}_{i_X})} \times \\ &\times \left[ \left( -E + \epsilon_{\mathbf{k}_R} + \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E) \right) G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X-\sigma}^<(E) + \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X-\sigma}^a(E) \right] \end{aligned} \quad (4.66)$$

Damit ist  $B_{T,-\sigma}$  bis auf die gemischte Greenfunktion  $G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X \sigma}$  bestimmt:

$$\begin{aligned} B_{T,-\sigma} &= \frac{i}{2\pi N} \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left\{ \frac{2}{U_R} \left[ \left( -E + \epsilon_{\mathbf{k}_R} + \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E) \right) \times \right. \right. \\ &\times G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X-\sigma}^<(E) \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} + \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X-\sigma}^a(E) \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} \left. \right] + \\ &\left. + G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X-\sigma}^<(E) \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} \right\} \end{aligned} \quad (4.67)$$

Nun kann erneut die Tunnelselbstenergie benutzt werden, um die gemischte Funktion vollständig auf die rechte Greenfunktion zurückzuführen. Durch Einsetzen der Ausdrücke (4.53) und (4.54) in die obige Bestimmungsgleichung von  $B_{T,-\sigma}$  und einigen Umformungen erhält man die Bandkorrektur. Details dieser Rechnung sind in Anhang .7 angegeben. Als Gesamtergebnis findet man für  $B_{T,-\sigma}$ :

$$\begin{aligned} B_{T,-\sigma} &= -\frac{i}{2\pi N} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a(E) \right) \times \right. \\ &\times \left( \frac{2}{U_R} \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E) - 1 \right) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) + \frac{2}{U_R} \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) \left. \right] \end{aligned} \quad (4.68)$$

Damit können alle drei in  $\tilde{A}_2$  auftretenden Bandkorrekturen zu einer Gesamtbandkorrektur  $B_{R,-\sigma}$  zusammengefasst werden:

$$\begin{aligned} \langle n_{R,-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{R,-\sigma} \rangle) B_{R,-\sigma} &\equiv T_{0,R} \langle n_{R,-\sigma} \rangle^2 + B_{SW,-\sigma} + B_{T,-\sigma} \\ &= -\frac{i}{2\pi N} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ \left( \frac{2}{U_R} \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E) - 1 \right) \times \right. \\ &\times \left( E - T_{0,R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E) \right) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) + \frac{2}{U_R} \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) \left. \right] \end{aligned} \quad (4.69)$$

Dabei wurde verwendet, dass es sich bei der Wechselwirkungsselbstenergie  $\Sigma_{\mathbf{k}_R \sigma}^r = \Sigma_{\mathbf{k}_R \sigma}^a$  um eine reelle Größe handelt.  $\tilde{A}_2$  nimmt somit die folgende, vergleichsweise kompakte Gestalt an:

$$\tilde{A}_2 = (2 + \langle n_{R,-\sigma} \rangle) \epsilon_{\mathbf{k}_R} \langle n_{R,-\sigma} \rangle + \langle n_{R,-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{R,-\sigma} \rangle) (B_{R,-\sigma} + T_{0,R}) \quad (4.70)$$

Die Berechnung der Momente ist somit im Prinzip abgeschlossen. Allerdings hängt das dritte Moment über die Bandkorrektur  $B_{R,-\sigma}$  von der nach wie vor unbestimmten Wech-

selwirkungsselbstenergie  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r$  ab. Für die Herleitung der Selbstenergie benötigt man zusätzlich die ersten drei Momente der Tunnelselbstenergie.

## 4.4 Hochenergieentwicklung der Tunnelselbstenergie

Die Tunnelselbstenergie lässt sich leicht in zwei Terme aufspalten, die jeweils dem Paramagneten bzw. dem Isolator mit Kopplung an den linken Ferromagnet entsprechen. Es wird sich zeigen, dass zur Berechnung der ersten drei Momente der Tunnelselbstenergie nur die ersten beiden Momente des Paramagneten bzw. des Isolators benötigt werden. Zunächst sollen die Momente des Paramagneten berechnet werden. Der entsprechende Term der Tunnelselbstenergie lautet (s. Gl. (3.41)):

$$\Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(P),r} = \sum_{\mathbf{k}_P} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_P} g_{\mathbf{k}_P\sigma}^r \epsilon_{\mathbf{k}_P\mathbf{k}_R} \quad (4.71)$$

Die Momente entsprechen somit bis auf einfache Vorfaktoren denen der freien paramagnetischen Greenfunktion  $g_{\mathbf{k}_P\sigma}^r$ . Das nullte Moment ist auch in diesem Fall trivial:

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{k}_P\sigma}^{(0)} &= \frac{1}{N} \sum_{i_P j_P} e^{-i\mathbf{k}_P \cdot (\mathbf{R}_{i_P} - \mathbf{R}_{j_P})} \underbrace{\langle [d_{i_P\sigma}, d_{j_P\sigma}^+]_+ \rangle}_{= \delta_{i_P j_P}} \\ &= 1 \end{aligned} \quad (4.72)$$

Für das erste Moment folgt mit dem Antikommutator (.20):

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{k}_P\sigma}^{(1)} &= \frac{1}{N} \sum_{i_P j_P} e^{-i\mathbf{k}_P \cdot (\mathbf{R}_{i_P} - \mathbf{R}_{j_P})} \langle [ [d_{i_P\sigma}, H]_-, d_{j_P\sigma}^+]_+ \rangle \\ &= \epsilon_{\mathbf{k}_P} \end{aligned} \quad (4.73)$$

Auch für den zweiten Term der Tunnelselbstenergie (s. Gl. (3.40)):

$$\Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(I),r} = \sum_{\mathbf{k}_I} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_I} G_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(L),r} \epsilon_{\mathbf{k}_I\mathbf{k}_R}, \quad (4.74)$$

der dem Isolator entspricht, werden nur die ersten beiden Momente benötigt. Das nullte Moment bereitet keine Schwierigkeiten:

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(0)} &= \frac{1}{N} \sum_{i_I j_I} e^{-i\mathbf{k}_I \cdot (\mathbf{R}_{i_I} - \mathbf{R}_{j_I})} \underbrace{\langle [d_{i_I\sigma}, d_{j_I\sigma}^+]_+ \rangle}_{= \delta_{i_I j_I}} \\ &= 1 \end{aligned} \quad (4.75)$$

#### 4 Nichtgleichgewichtsspektraldichteansatz

Für das erste Moment folgt mit Verwendung des Antikommutator (.19):

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(1)} &= \frac{1}{N} \sum_{i_I j_I} e^{-i\mathbf{k}_I \cdot (\mathbf{R}_{i_I} - \mathbf{R}_{j_I})} \langle [ [d_{i_I\sigma}, H]_-, d_{j_I\sigma}^+ ]_+ \rangle \\ &= \epsilon_{\mathbf{k}_I} \end{aligned} \quad (4.76)$$

Mit Hilfe dieser Momente lässt sich die Hochenergieentwicklung der Tunnelselbstenergie angeben. Sie folgt nämlich unmittelbar aus den Entwicklungen der Greenfunktionen, die im Wesentlichen durch die Momente charakterisiert sind:

$$g_{\mathbf{k}_P\sigma}^r(E) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{M_{\mathbf{k}_P\sigma}^{(m)}}{E^{m+1}} \quad (4.77)$$

$$G_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(L),r}(E) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{M_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(m)}}{E^{m+1}} \quad (4.78)$$

Daher gilt für die Tunnelselbstenergie:

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) &= \sum_{\mathbf{k}_I} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_I} G_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(L),r}(E) \epsilon_{\mathbf{k}_I\mathbf{k}_R} + \sum_{\mathbf{k}_P} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_P} g_{\mathbf{k}_P\sigma}^r(E) \epsilon_{\mathbf{k}_P\mathbf{k}_R} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \left( \sum_{\mathbf{k}_I} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_I} \frac{M_{\mathbf{k}_I\sigma}^{(m)}}{E^{m+1}} \epsilon_{\mathbf{k}_I\mathbf{k}_R} + \sum_{\mathbf{k}_P} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_P} \frac{M_{\mathbf{k}_P\sigma}^{(m)}}{E^{m+1}} \epsilon_{\mathbf{k}_P\mathbf{k}_R} \right) \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_X} M_{\mathbf{k}_X\sigma}^{(m)} \epsilon_{\mathbf{k}_X\mathbf{k}_R}}{E^{m+1}} \\ &\stackrel{!}{=} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{D_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(m)}}{E^m} \end{aligned} \quad (4.79)$$

Die ersten drei Momente der Tunnelselbstenergie können somit direkt aus den bereits berechneten Momenten der beiden Greenfunktionen des Isolators und des Paramagneten bestimmt werden. Man liest ab:

$$D_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)} = 0 \quad (4.80)$$

$$D_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)} = \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_X\mathbf{k}_R} \quad (4.81)$$

$$D_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(2)} = \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_X\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}_X\mathbf{k}_R} \quad (4.82)$$

Damit sind nun alle Größen bekannt, die zur Bestimmung der Wechselwirkungsselbstenergie benötigt werden. Sie wird im nächsten Abschnitt berechnet.

## 4.5 Bestimmung der Wechselwirkungsselbstenergie

Indem man die berechneten Momente (4.19), (4.22), (4.27), (4.29), (4.80), (4.81) und (4.82) aus den letzten Abschnitten in die Bestimmungsgleichungen (4.11) bis (4.13) der  $C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(m)}$  einsetzt, ergeben sich explizite Ausdrücke für die Entwicklungskoeffizienten der Wechselwirkungsselbstenergie:

$$C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)} = U_R \langle n_{R,-\sigma} \rangle \quad (4.83)$$

$$C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)} = U_R^2 \langle n_{R,-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{R,-\sigma} \rangle) \quad (4.84)$$

$$C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(2)} = U_R^2 \langle n_{R,-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{R,-\sigma} \rangle) (B_{R,-\sigma} + T_{0,R}) + U_R^3 \langle n_{R,-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{R,-\sigma} \rangle)^2 \quad (4.85)$$

Diese Ausdrücke sind formal mit den Koeffizienten der SDA identisch [105], d.h. auch die Selbstenergie wird dieselbe Form wie im Gleichgewicht haben. Der weitere Lösungsweg entspricht daher der Ableitung der SDA-Selbstenergie. Für hohe Energien  $E$  ist es gerechtfertigt, sich in der Entwicklung der Selbstenergie

$$\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(m)}}{E^m} \quad (4.86)$$

auf die niedrigsten Ordnungen von  $1/E$  zu beschränken. Somit gilt näherungsweise:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) &= C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)} + \frac{C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)}}{E} + \frac{C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(2)}}{E^2} + \dots \\ &= C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)} + \frac{C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)}}{E} \left( 1 + \frac{C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(2)}}{C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)} E} + \dots \right) \\ &\approx C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(0)} + \frac{C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)}}{E - \frac{C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(2)}}{C_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(1)}}} \\ &= U_R \langle n_{R,-\sigma} \rangle + \frac{U_R^2 \langle n_{R,-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{R,-\sigma} \rangle)}{E - B_{R,-\sigma} - T_{0,R} - U_R (1 - \langle n_{R,-\sigma} \rangle)} \\ &= U_R \langle n_{R,-\sigma} \rangle \frac{E - B_{R,-\sigma} - T_{0,R}}{E - B_{R,-\sigma} - T_{0,R} - U_R (1 - \langle n_{R,-\sigma} \rangle)} \end{aligned} \quad (4.87)$$

Dies ist der endgültige Ausdruck für die retardierte Wechselwirkungsselbstenergie der NSDA. Wie bereits begründet wurde, ist sie formal identisch zur Gleichgewichts-SDA. Der Unterschied zwischen beiden liegt in der Berechnung der Bandkorrektur  $B_{R,-\sigma}$  in Gl. (4.69).

## 4.6 Gleichgewichtsgrenzfall

Im Grenzfall verschwindender Kopplung zwischen den vier Regionen der Tunnelstruktur, d.h. für  $\epsilon_{\mathbf{k}_M \mathbf{k}_I}, \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_P} \rightarrow 0$ , geht das System ins thermodynamische Gleichgewicht über. Der rechte Ferromagnet wird dann nur noch durch ein reines Ein-Band-Hubbard-Modell beschrieben, da die anderen Schichten keinen Einfluss mehr auf ihn nehmen können. Daher muss die NSDA, um glaubwürdig zu sein, in diesem Fall in die SDA übergehen. Um dies zu beweisen, ist lediglich zu zeigen, dass die Bandkorrektur  $B_{R,-\sigma}$  in ihren Gleichgewichtsausdruck [105]

$$\begin{aligned} & \langle n_{R,-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{R,-\sigma} \rangle) B_{R,-\sigma}^{SDA} = \\ & = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_R} (\epsilon_{\mathbf{k}_R} - T_{0,R}) \int_{-\infty}^{\infty} dE f_R(E) \left( \frac{2}{U_R} (E - \epsilon_{\mathbf{k}_R}) - 1 \right) S_{\mathbf{k}_R-\sigma}(E) \end{aligned} \quad (4.88)$$

übergeht, da die NSDA-Selbstenergie ansonsten formal identisch zur SDA-Selbstenergie ist. Zunächst gelten mit verschwindenden Hybridisierungen die folgenden Zusammenhänge:

$$\Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^{r,a,<}(E) \stackrel{\epsilon_{\mathbf{k}_M \mathbf{k}_I}, \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_P} \rightarrow 0}{=} 0 \quad (4.89)$$

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) \stackrel{\epsilon_{\mathbf{k}_M \mathbf{k}_I}, \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_P} \rightarrow 0}{=} \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E)} \quad (4.90)$$

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) \stackrel{\epsilon_{\mathbf{k}_M \mathbf{k}_I}, \epsilon_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_P} \rightarrow 0}{=} -2if_R(E) \text{Im } G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) \quad (4.91)$$

Die ersten beiden Ausdrücke sind offensichtlich, da die Tunnelselbstenergien quadratisch von den Kopplungen abhängen und somit für verschwindende Hybridisierung ebenfalls gegen Null gehen müssen. Damit ergibt sich der übliche Ausdruck für die Greenfunktion, die nun allein durch die Wechselwirkungsselbstenergie charakterisiert ist. Die dritte Gleichung erhält man durch Ausnutzen des Spektraltheorems, was im Gleichgewichtsgrenzfall natürlich erlaubt ist. An dieser Stelle taucht zum ersten Mal die Fermifunktion im rechten Metall auf. Bisher hatte sie keine Rolle gespielt, da im Nichtgleichgewicht kein chemisches Potential existiert. Ihr Auftreten ist eine direkte Konsequenz der Annahme, dass der rechte Ferromagnet sich nun im Gleichgewicht befindet. Setzt man die obigen Ausdrücke in die NSDA-Bandkorrektur (4.69) ein, erhält man:

$$\begin{aligned} & \langle n_{R,-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{R,-\sigma} \rangle) B_{R,-\sigma}^{eq} = -\frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_R(E) \times \\ & \times \left( \frac{2}{U_R} \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E) - 1 \right) \left( E - T_{0,R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E) \right) \text{Im } G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E) \end{aligned} \quad (4.92)$$

Der Index „eq“ an der Bandkorrektur soll darauf hindeuten, dass es sich um eine Beziehung handelt, die nur im Gleichgewicht gilt. Der Term in der zweiten Zeile lässt sich

weiter umformen, wenn man ausnutzt, dass die Selbstenergie reell ist:

$$\begin{aligned}
 (E - T_{0,R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r) \operatorname{Im} G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r &= \operatorname{Im} \left[ (E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r + \epsilon_{\mathbf{k}_R} - T_{0,R}) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \right] \\
 &= \operatorname{Im} \left[ (G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r)^{-1} G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r + (\epsilon_{\mathbf{k}_R} - T_{0,R}) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \right] \\
 &= (\epsilon_{\mathbf{k}_R} - T_{0,R}) \operatorname{Im} G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r
 \end{aligned} \tag{4.93}$$

Auf ähnliche Weise lässt sich folgender Ausdruck zeigen, der ebenfalls im Integranden vorkommt:

$$\begin{aligned}
 \frac{2}{U_R} \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \operatorname{Im} G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r &= -\frac{2}{U_R} (E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r - E + \epsilon_{\mathbf{k}_R}) \operatorname{Im} G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \\
 &= -\frac{2}{U_R} \operatorname{Im} \left[ (G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r)^{-1} G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r - (E - \epsilon_{\mathbf{k}_R}) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \right] \\
 &= \frac{2}{U_R} (E - \epsilon_{\mathbf{k}_R}) \operatorname{Im} G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r
 \end{aligned} \tag{4.94}$$

Der Gleichgewichtsgrenzfall der NSDA-Bandkorrektur lautet damit also:

$$\begin{aligned}
 &\langle n_{R,-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{R,-\sigma} \rangle) B_{R,-\sigma}^{eq} = \\
 &= -\frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k}_R} (\epsilon_{\mathbf{k}_R} - T_{0,R}) \int_{-\infty}^{\infty} dE f_R(E) \left( \frac{2}{U_R} (E - \epsilon_{\mathbf{k}_R}) - 1 \right) \operatorname{Im} G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E) \\
 &\stackrel{(.33)}{=} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_R} (\epsilon_{\mathbf{k}_R} - T_{0,R}) \int_{-\infty}^{\infty} dE f_R(E) \left( \frac{2}{U_R} (E - \epsilon_{\mathbf{k}_R}) - 1 \right) S_{\mathbf{k}_R-\sigma}(E)
 \end{aligned} \tag{4.95}$$

Dies ist gerade die bereits angegebene Bestimmungsgleichung der Bandkorrektur im Gleichgewicht. Somit ist bewiesen, dass die NSDA im Gleichgewichtsgrenzfall die SDA korrekt reproduziert.





## 5 Numerische Resultate

In den vorangegangenen Kapiteln wurde ein theoretisches Modell zur Beschreibung von magnetischen Tunnelstrukturen entwickelt. Dabei wurden ausschließlich analytische Methoden verwendet. Allerdings ist praktisch keine moderne Vielteilchentheorie analytisch exakt auswertbar. Die vorliegende Arbeit stellt hierbei keine Ausnahme dar. Insbesondere die Selbstkonsistenzprobleme zur Berechnung der Besetzungszahl bzw. der Bandkorrekturen können ausschließlich numerisch gelöst werden. Somit kommt man nicht umhin zur Darstellung der konkreten Ergebnisse der Theorie auf numerische Methoden zurückzugreifen.

Bevor die eigentliche Theorie ausgewertet wird, soll zunächst anhand des in Abschnitt 3.6 vorgestellten Zweibandhybridisierungsmodells der Einfluss der Hybridisierung diskutiert werden. Daran schließt sich eine kurze Darstellung der wesentlichen Eigenschaften der Gleichgewichts-SDA an. Die Erkenntnisse aus diesen beiden Abschnitten werden das Verständnis des Verhaltens des vollständigen Modells sehr erleichtern. Dieses wird in den darauf folgenden Abschnitten dargelegt. Der linke Kontakt wird dabei in Mean Field-Näherung behandelt, während der rechte Ferromagnet durch die in Kapitel 4 vorgestellte NSDA beschrieben wird. Es wird gezeigt, dass das Modell tatsächlich in der Lage ist, strominduziertes Schalten zu zeigen und dass die Ergebnisse qualitativ mit experimentellen Resultaten übereinstimmen. Nach der Diskussion des Tunnelstroms wird die Abhängigkeit von den Modellparametern systematisch untersucht. Der Bandschwerpunkt des rechten Ferromagneten nimmt dabei eine gewisse Sonderrolle ein, die in Abschnitt 5.7 ausführlich beleuchtet wird. Anschließend wird dargestellt, wie sich die Ergebnisse verändern, wenn beide Ferromagnete in Mean Field- bzw. in SDA- und NSDA-Näherung beschrieben werden. Das Kapitel schließt mit der Diskussion der Nichterhaltung der Wellenzahl beim Tunnelprozess, die in Abschnitt 3.5.3 begonnen wurde.

### 5.1 Einfaches Hybridisierungsmodell

In diesem Abschnitt soll zur Vorbereitung der Diskussion der vollständigen Theorie zunächst auf das Verhalten des Zweibandhybridisierungsmodells aus Abschnitt 3.6 eingegangen werden. Es eignet sich besonders gut, um den Einfluss der Hybridisierung in einfacher Form darzustellen. Gerade ihre Eigenschaften werden bei der späteren Besprechung der spannungsabhängigen Magnetisierung wesentlich zum Verständnis beitragen. Das Modell besitzt trotz seiner Einfachheit eine ganze Reihe von freien Parametern: die Bandbreiten  $W_\alpha$ , die Bandschwerpunkte  $T_{0,\alpha}$ , die spektralen Gewichte  $\gamma_\alpha$  und Verschiebungen  $V_\alpha$  der jeweiligen Subbänder sowie die Hybridisierungsstärke  $\epsilon$ . Der Index  $\alpha = 1, 2$  bezeichnet dabei das jeweilige Band. Der Einfachheit halber wird im Folgenden die Breite der beiden Bänder immer gleich gewählt, d.h.  $W_1 = W_2 = W$ . Außerdem soll

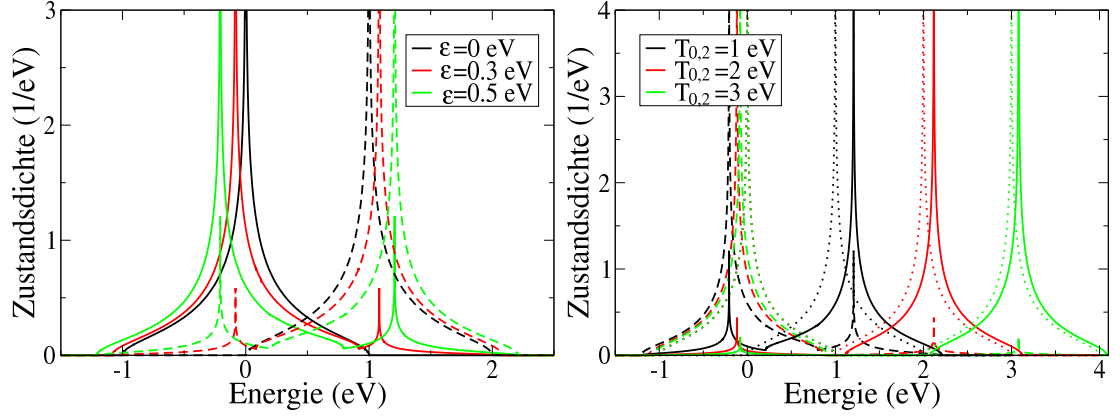


Abbildung 5.1: Links: Zustandsdichten von zwei miteinander hybridisierenden Bänder für verschiedene Hybridisierungsstärken  $\epsilon$ . Die Zustandsdichte des unteren Bandes ist durchgezogen, die des oberen Bandes gestrichen dargestellt. Parameter:  $W = 2$  eV,  $T_{0,2} = 1$  eV,  $\gamma = 1$ . Rechts: Zustandsdichten der beiden Bänder für verschiedene Bandschwerpunkte  $T_{0,2}$  des oberen Bands. Die Zustandsdichte des unteren Bandes ist gestrichen, die des oberen Bandes durchgezogen dargestellt. Zusätzlich sind die Zustandsdichten der beiden Bänder mit abgeschalteter Hybridisierung gepunktet eingezeichnet. Parameter:  $W = 2$  eV,  $\epsilon = 0.5$  eV,  $\gamma = 1$ .

der Bandschwerpunkt des ersten Bands den Energienullpunkt definieren,  $T_{0,1} \equiv 0$  eV.

Am Besten lässt sich das Verhalten des Modells anhand der entsprechenden Zustandsdichten  $\rho_\alpha(E)$  verstehen. Diese hängen über die Beziehung

$$\rho_\alpha(E) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im } G_{\mathbf{k}\alpha}^r(E) \quad (5.1)$$

eng mit den Greenfunktionen (3.127) und (3.128) zusammen. Im linken Bild von Abb. 5.1 sind die Zustandsdichten für verschiedene Stärken der Hybridisierung dargestellt. Mit ausgeschalteter Hybridisierung ( $\epsilon = 0$  eV) ergeben sich erwartungsgemäß zwei starr um den Bandschwerpunkt  $T_{0,2} = 1$  eV gegeneinander verschobene Bänder. Bei endlichen Hybridisierungsstärken werden zwei Effekte sichtbar. Zum einen weisen beide Bänder endliche Zustandsdichten im Bereich des jeweils anderen Bands auf. Somit werden aus den zwei Bändern praktisch vier, wobei die spektralen Gewichte der neuen Bänder mit steigender Hybridisierung zunehmen. Da die Gesamtzustandsdichte natürlich auch mit Hybridisierung weiterhin normiert bleiben muss, bedeutet dies, dass die ursprünglichen Bänder spektrales Gewicht abgeben müssen.

Als zweiter Effekt der Hybridisierung ist zu beobachten, dass die Bandschwerpunkte der beiden Bänder verschoben werden. Es ist deutlich erkennbar, dass mit steigendem  $\epsilon$  das untere Band zu tieferen Energien und das obere Band zu höheren Energien rutschen. Damit kann man schließen, dass eine Hybridisierung zwischen zwei Bändern abstoßend

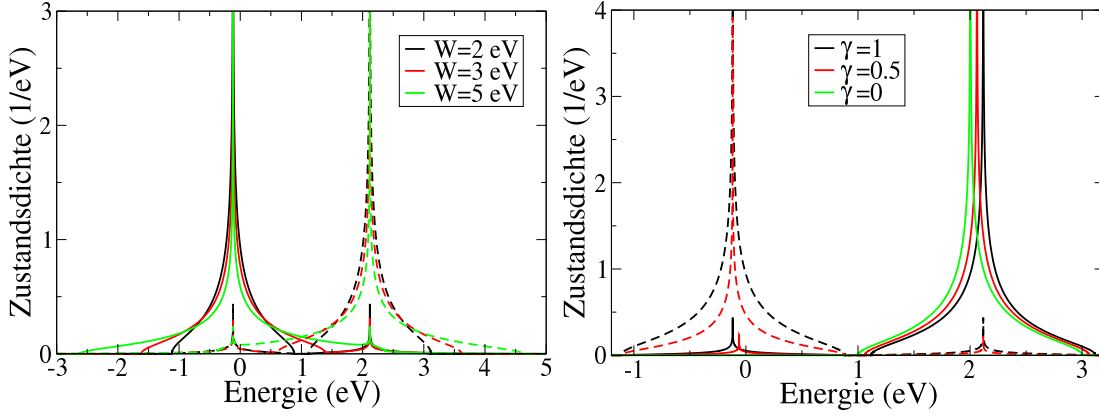


Abbildung 5.2: Links: Zustandsdichten zweier miteinander hybridisierenden Bänder für verschiedene Bandbreiten  $W$ . Das obere Band ist gestrichen, das untere durchgezogen dargestellt. Parameter:  $T_{0,2} = 2$  eV,  $\epsilon = 0.5$  eV,  $\gamma = 1$ . Rechts: Zustandsdichten der beiden Bänder für verschiedene spektrale Gewichte  $\gamma$  des unteren Bandes. Der zweite Anteil des unteren Bandes liegt bei  $T_{0,1} + V_1 = -100$  eV und ist nicht dargestellt. Das untere Band ist gestrichen, das obere durchgezogen gezeichnet. Parameter:  $W = 2$  eV,  $T_{0,2} = 2$  eV,  $\epsilon = 0.5$  eV,  $V_1 = -100$  eV.

wirkt, wobei die Abstoßung umso stärker wird, je größer die Hybridisierung ist. Dieser Effekt wird sich als entscheidend für die Modellierung von strominduziertem Schalten erweisen. Daher soll nun insbesondere untersucht werden, welchen Einfluss die restlichen Parameter auf die Stärke der Abstoßung haben.

Im rechten Bild von Abb. 5.1 sind wiederum die Zustandsdichten dargestellt, nun aber für verschiedene Schwerpunkte des oberen Bandes. Um die Größe der Abstoßung besser sichtbar zu machen, sind außerdem noch die Zustandsdichten der Bänder ohne Hybridisierung gepunktet eingezeichnet. Insbesondere an den oberen Bändern kann der Einfluss des Bandschwerpunkts gut diskutiert werden. Man erkennt, dass die Bänder mit Hybridisierung aufgrund der Abstoßung immer oberhalb der Bänder ohne Hybridisierung liegen. Allerdings ist die Stärke der Abstoßung offenbar nicht konstant. Vergleicht man zum Beispiel die Differenz der beiden schwarzen Maxima (niedriger Bandschwerpunkt) mit der der grünen Maxima (hoher Bandschwerpunkt), so wird deutlich, dass für hohe Bandschwerpunkte die Abstoßung schwächer wird. Dies ist eine weitere Eigenschaft, die für die spätere Diskussion wichtig sein wird: je größer der Abstand zwischen den Bändern, desto weniger stark stoßen sie sich ab. Außerdem nehmen auch die Hybridisierungsanteile der Zustandsdichten mit höherem Bandschwerpunkt deutlich ab.

Die Bandbreite  $W$  hat hingegen keinen Einfluss auf die Stärke der Abstoßung. Dies ist im linken Bild von Abb. 5.2 zu sehen, da die Maxima der beiden Bänder für alle dargestellten Bandbreiten bei derselben Energie liegen.

Der letzte zu diskutierende Modellparameter ist das spektrale Gewicht. Es wird nur das spektrale Gewicht  $\gamma = \gamma_1$  des unteren Bandes geändert, da eine Variation von  $\gamma_2$

aufgrund der Symmetrie des Systems zu vollkommen analogen Ergebnissen führen würde. Die beiden Subbänder des unteren Bands werden um  $V_1 = -100$  eV gegeneinander verschoben. Dies hat zur Folge, dass das erste Subband mit spektralem Gewicht  $\gamma$  bei  $T_{0,1} = 0$  eV liegt und das zweite mit dem Gewicht  $1 - \gamma$  sich dagegen bei  $T_{0,1} + V = -100$  eV befindet. Durch den großen Abstand des zweiten Subbands zum anderen Band kann davon ausgegangen werden, dass es keinen Einfluss auf die Hybridisierung zwischen den Bändern haben kann. Diese wird somit allein vom ersten Subband bestimmt.

Im rechten Bild von Abb. 5.2 sind die Zustandsdichten für verschiedene Werte von  $\gamma$  gezeigt. Mit sinkendem  $\gamma$  wird spektrales Gewicht in das nicht dargestellte untere Subband verlagert. Durch diese Verlagerung wird die Abstoßung zwischen den Bändern erkennbar schwächer. Dies macht sich dadurch bemerkbar, dass das obere Band (durchgezogene Kurven) mit sinkendem  $\gamma$  zu tieferen Energien rutscht. Größeres spektrales Gewicht bedeutet im Umkehrschluss somit stärkere Abstoßung.

Damit sind die wesentlichen Abhängigkeiten der Abstoßung bzw. Hybridisierung von den Modellparametern bekannt. Die Stärke der Abstoßung wird durch die Größe der Hybridisierung, dem energetischen Abstand der Bänder und ihrem spektralen Gewicht festgelegt. Diese Erkenntnisse können somit in den folgenden Abschnitten zur Interpretation der numerischen Resultate verwendet werden.

## 5.2 SDA im Gleichgewicht

Als weitere Vorbereitung zur Diskussion des eigentlichen Modells bietet sich die Erklärung des Verhaltens der SDA im Gleichgewicht an. Wie bereits in Kapitel 4 gezeigt, ergibt sie sich als Grenzfall der NSDA für verschwindende Kopplung des rechten Ferromagneten an die übrigen Schichten. Die SDA wurde in anderen Arbeiten bereits sehr intensiv diskutiert [105, 119, 120], daher soll an dieser Stelle nur ein knapper Überblick über ihre wesentlichen Eigenschaften gegeben werden. Der Schwerpunkt liegt dabei natürlich auf solchen Eigenschaften, die sie mit der NSDA gemeinsam hat.

Die Parameter der SDA sind neben der Gitterstruktur die Besetzungszahl  $n$ , das Verhältnis von Coulomb-Wechselwirkungsstärke zur Bandbreite  $U/W$  und die Temperatur  $T$ . Als Gitterstruktur wird das dreidimensionale kubisch raumzentrierte Gitter (bcc) verwendet. Für die spätere Diskussion ist vor allem das Verhalten der Magnetisierung von Interesse. Es wird sich zeigen, dass SDA und NSDA größtenteils qualitativ ähnliche Ergebnisse liefern. Daher ist es durchaus sinnvoll, die einzelnen Parameterabhängigkeiten zuerst für die einfachere SDA zu verstehen und anschließend erst zu dem vollen Nichtgleichgewichtsproblem überzugehen.

Praktisch alle Eigenschaften der SDA können anhand ihrer Quasiteilchenzustandsdichte (QDOS) diskutiert und verstanden werden. In Abb. 5.3 ist sie für den in der Bildunterschrift angegebenen Parametersatz dargestellt. Zusätzlich wurde noch die Mean Field-Zustandsdichte zu Vergleichszwecken eingezeichnet. Eine wesentliche Eigenschaft der SDA ist, dass sie die beiden Spinbänder in die sogenannten Hubbard-Bänder bei  $E \approx T_0$  und  $E \approx T_0 + U$  aufspaltet. Die Mean Field-Näherung führt andererseits nur zu einer starren Verschiebung der Bänder. Die Aufspaltung in die beiden Hubbard-Bänder

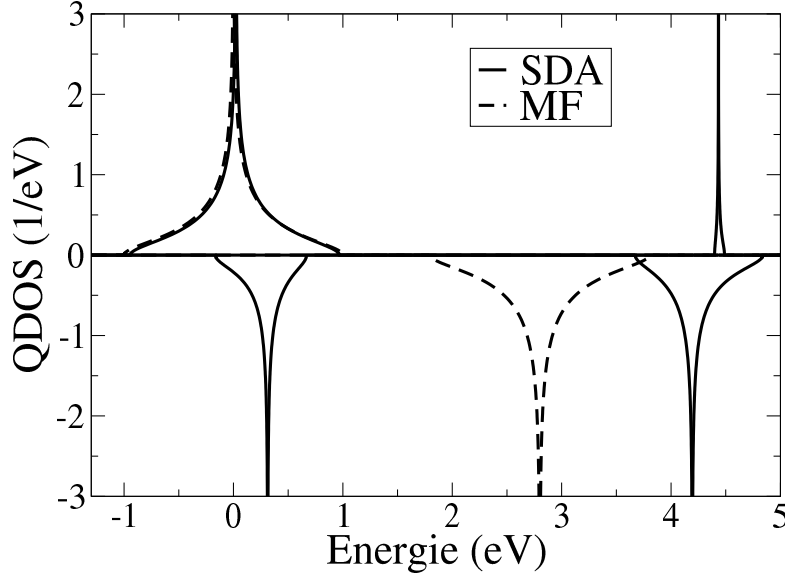


Abbildung 5.3: Quasiteilchenzustandsdichte in SDA- und Mean Field-Näherung. Parameter:  $n = 0.7$ ,  $U = 4$  eV,  $W = 2$  eV,  $T_0 = 0$  eV,  $T = 0$  K

tritt, vom trivialen Fall  $U = 0$  eV einmal abgesehen, für alle Parameterwerte auf. Es kommt lediglich zu einer Verschiebung von spektralem Gewicht zwischen den einzelnen Bändern (vgl. Abb. 5.4).

Im linken Bild von Abb. 5.5 ist die Magnetisierung in Abhängigkeit der Besetzungszahl  $n$  dargestellt. Als Vergleichsgröße ist zusätzlich die Mean Field-Magnetisierung eingezeichnet. Offenbar verhalten sich beide Magnetisierungen qualitativ ähnlich: eine endliche Magnetisierung  $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$  existiert erst ab einer bestimmten kritischen Besetzungszahl. Oberhalb dieser steigt die Magnetisierung monoton an und geht anschließend in die Sättigung  $m = n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$  über. Die Existenz einer solchen kritischen, minimalen Besetzungszahl ist unabhängig von der Näherung anhand des Modells relativ leicht einzusehen, da die Hubbard-Wechselwirkung  $Un_{i\sigma}n_{i-\sigma}$  am Gitterplatz  $\mathbf{R}_i$  offenbar nur dann von Null verschieden sein kann, wenn der Gitterplatz mit Elektronen unterschiedlicher Spinrichtung doppelt besetzt ist. Für geringe Teilchendichten ist die Wahrscheinlichkeit hierfür allerdings gering, wodurch der Hubbard-Term näherungsweise vernachlässigt werden kann. Damit ist dann natürlich auch eine spontane Magnetisierung ausgeschlossen. Jede glaubwürdige Näherung des Hubbard-Modells sollte also erst oberhalb einer gewissen kritischen Besetzungszahl eine endliche Magnetisierung zeigen.

Ein Unterschied zwischen beiden Näherungen besteht darin, dass die kritische Besetzungszahl  $n_C^{MF} \approx 0.1$  der Mean Field-Näherung deutlich kleiner ist als die der SDA ( $n_C^{SDA} \approx 0.6$ ). Darin spiegelt sich die bereits erwähnte Tatsache wider, dass die Mean Field-Näherung die Stabilität des Ferromagnetismus deutlich überschätzt. Außerdem geht die Mean Field-Magnetisierung oberhalb der kritischen Besetzungsdichte praktisch sofort in die Sättigung über. Bei der SDA ist der Bereich in dem zwar endliche Magne-

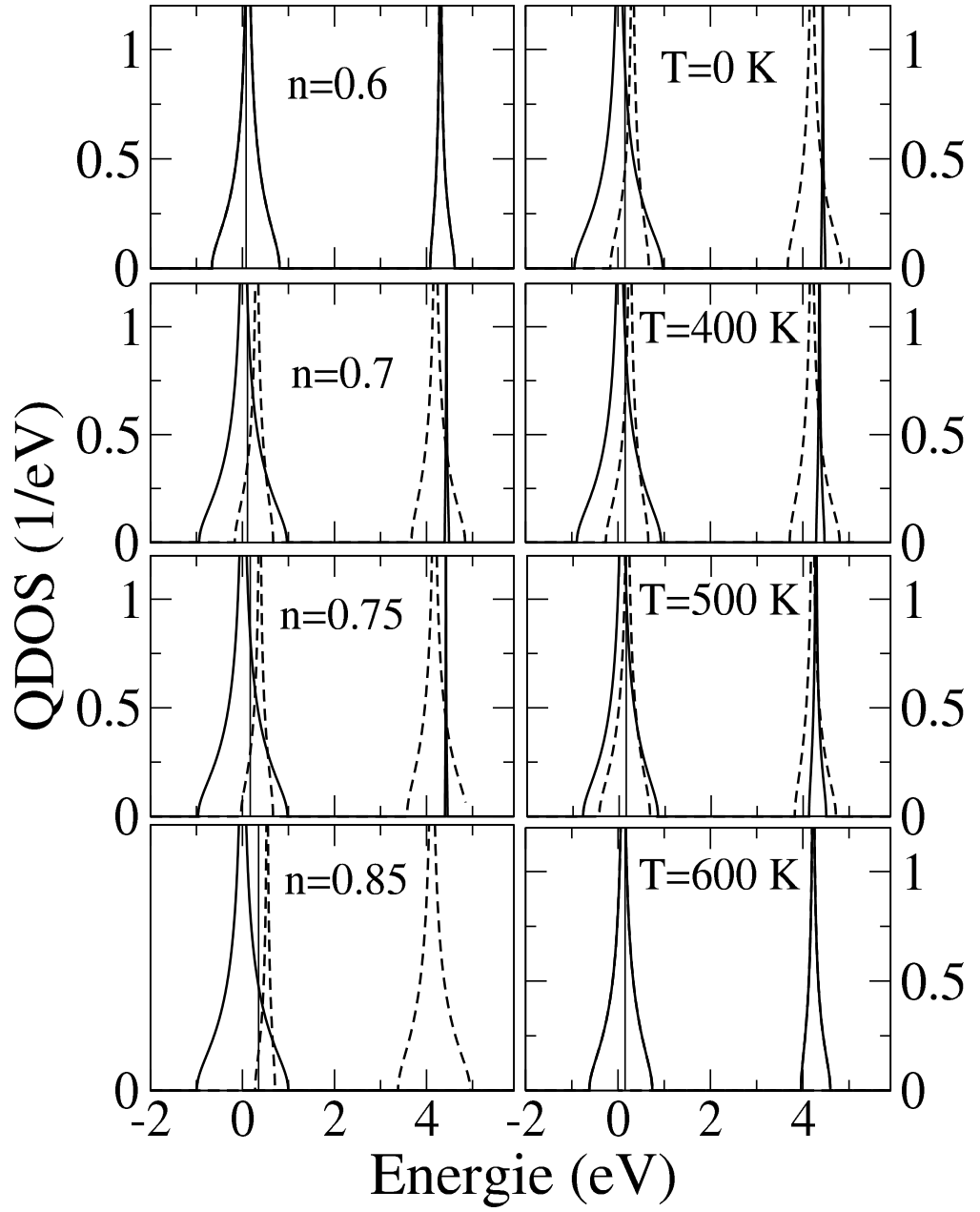


Abbildung 5.4: Quasiteilchenzustandsdichten in SDA-Näherung. Spin Up-QDOS sind als durchgezogene, Spin Down-QDOS als gestrichene Linien eingezeichnet. In der linken Spalte sind sie für verschiedene Werte der Besetzungszahl  $n$ , in der rechten für verschiedene Temperaturen  $T$  gezeigt. Das chemische Potential wird durch die geraden Linien symbolisiert. Parameter:  $U = 4$  eV,  $W = 2$  eV,  $T_0 = 0$  eV,  $n = 0.7$  (rechts) und  $T = 0$  K (links).

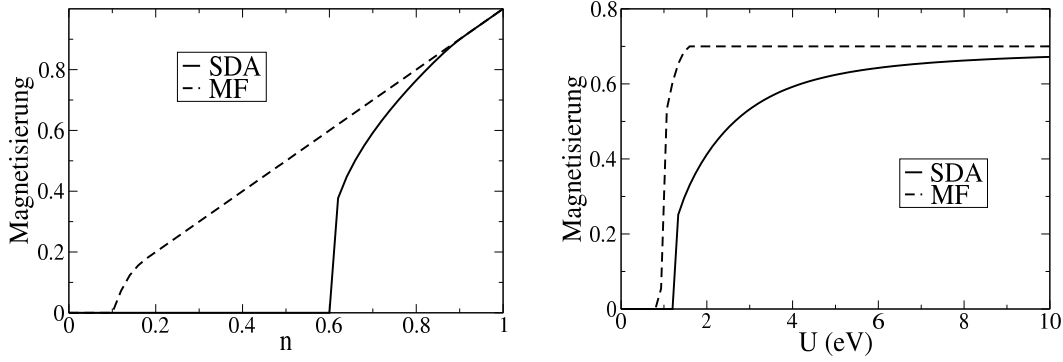


Abbildung 5.5: Links: Magnetisierung als Funktion der Besetzungszahl  $n$ . Rechts: Magnetisierung als Funktion der Coulomb-Wechselwirkungsstärke  $U$ . Die durchgezogenen Linien wurden jeweils mit der SDA-, die gestrichenen mit der Mean Field-Näherung berechnet. Parameter:  $U = 4$  eV (links),  $n = 0.7$  (rechts),  $W = 2$  eV,  $T = 0$  K

tisierung, aber noch keine Sättigung, d.h.  $0 < m < n$ , vorliegt, deutlich größer. Auch dies ist ein Kennzeichen der verringerten magnetischen Stabilität der SDA gegenüber Mean Field. Dieses Verhalten lässt sich auch anhand der entsprechenden Quasiteilchenzustandsdichten (linke Spalte in Abb. 5.4) nachvollziehen. Bei  $n = 0.6$  existiert noch kein Magnetismus, daher ist auch kein Unterschied zwischen den beiden spinabhängigen Quasiteilchenzustandsdichten erkennbar. Dies ist erst bei den Bildern für höheres  $n$  der Fall. Mit steigender Besetzungszahl verlagert sich immer mehr spektrales Gewicht vom oberen ins untere Spin Up-Band. Das Spin Down-Band verhält sich genau umgekehrt. Bei  $n \approx 0.85$  ist die Sättigung erreicht, d.h. es gibt gar keine besetzten Spin Down-Zustände mehr. Dadurch verschwindet auch das obere Spin Up-Band.

Auf analoge Weise lässt sich das Verhalten der Magnetisierung in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke im rechten Bild von Abb. 5.5 verstehen. Für zu kleines  $U$  kann der Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung gegenüber dem kinetischen Anteil vernachlässigt werden und daher kann keine spontane Magnetisierung entstehen. Das kritische  $U$ , das benötigt wird, ist für Mean Field ( $U_C^{MF} \approx 0.8$  eV) etwas kleiner als für die SDA ( $U_C^{SDA} \approx 1.2$  eV). Oberhalb der kritischen Wechselwirkungsstärke geht die Mean Field-Lösung wiederum sehr schnell in die Sättigung  $m = n$  über und hängt dann nicht mehr von  $U$  ab. Die SDA-Lösung steigt zwar ebenfalls an, erreicht ihren Sättigungswert aber erst deutlich später.

Genau genommen ist  $U$  alleine noch nicht sehr aussagekräftig. Der eigentliche Parameter ist der Quotient  $U/W$ , also das Verhältnis von Coulomb-Wechselwirkung und Bandbreite bzw. Hopping. Um den Vergleich mit den später in diesem Kapitel zu diskutierenden NSDA-Ergebnissen zu erleichtern, wird die Abhängigkeit von diesen beiden Parametern jedoch getrennt behandelt. Am linken Bild von Abb. 5.6 erkennt man, dass sich die Magnetisierung in Abhängigkeit der Bandbreite  $W$  qualitativ genau umgekehrt wie in Abhängigkeit von  $U$  verhält: für kleine  $W$  ist die Magnetisierung gesättigt, nimmt aber mit steigendem  $W$  ab, um dann oberhalb einer kritischen Bandbreite komplett zu-

## 5 Numerische Resultate

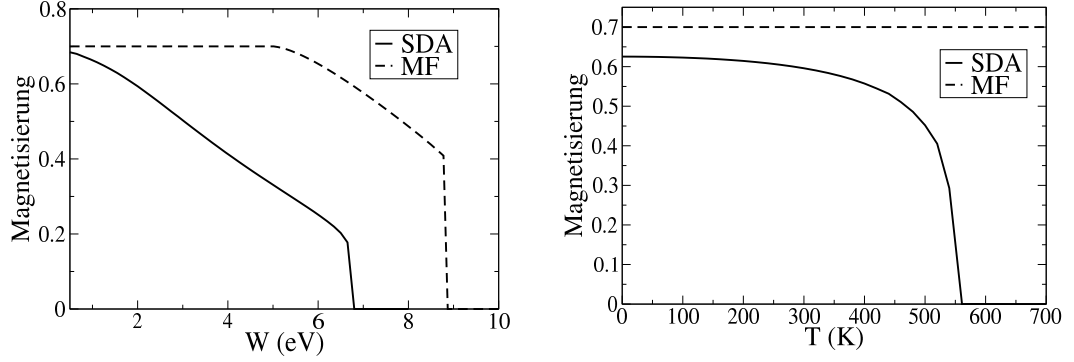


Abbildung 5.6: Magnetisierung in Abhängigkeit der Bandbreite (links) bzw. der Temperatur (rechts) in SDA- und Mean Field-Näherung. Im rechten Bild ist die Mean Field-Kurve aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht vollständig dargestellt. Parameter:  $n = 0.7$ ,  $U = 4$  eV,  $W = 2$  eV (rechts),  $T = 0$  K (links).

sammenzuberechnen. Da der kinetische Term des Hamilton-Operators (3.1) proportional zu  $W$  ist, lässt sich der Hubbard-Term für großes  $W \gg U$  und festgehaltenes  $U$  wiederum näherungsweise vernachlässigen, wodurch eine spontane Magnetisierung unmöglich wird. Wie bereits bei den anderen Parametern beobachtet wurde, führt die Mean Field-Näherung auch in diesem Fall über einen deutlich ausgedehnteren Parameterbereich zu endlicher Magnetisierung, die auch durchgehend größer als die der SDA ist.

Die Abhängigkeit der Magnetisierung vom letzten Modellparameter, der Temperatur  $T$ , ist im rechten Bild von Abb. 5.6 gezeigt. Man erkennt eine typische, Brillouin-förmige Magnetisierungskurve: sie startet bei  $T = 0$  K mit ihrem Sättigungswert, um dann mit steigender Temperatur stetig und monoton abzunehmen. Die Abnahme beschleunigt sich bei höherem  $T$ , was vor allem in der Nähe der Curie-Temperatur ( $T_C \approx 560$  K für die in der Abbildung gewählten Parameter) klar zu erkennen ist. Die Mean Field-Magnetisierung ist aus Gründen der Übersichtlichkeit nur zum Teil dargestellt. In dem betrachteten Parameterbereich zeigt sie offenbar gar keine besondere Temperaturabhängigkeit. Qualitativ verhält sie sich allerdings genauso wie die SDA-Kurve, allerdings mit einem  $T_C$  von über 100 000 K! Daher befindet sich der dargestellte Bereich noch in der Sättigung; eine Temperaturabhängigkeit würde man erst bei deutlich höheren Temperaturen sehen.

Die temperaturabhängigen Quasiteilchenzustandsdichten sind in der rechten Spalte von Abb. 5.4 dargestellt. Zwischen den  $T = 0$  K- und den  $T = 400$  K-Bildern ist kaum ein Unterschied zu erkennen. Daher ändert sich auch die Magnetisierung in diesem Bereich nur sehr wenig. Bei  $T = 500$  K hat die Asymmetrie zwischen den beiden Spinrichtungen dagegen schon deutlich abgenommen, indem spektrales Gewicht vom unteren ins obere Spin Up-Band und in umgekehrter Richtung für das Spin Down-Band verlagert wurde. Bei  $T = 600$  K, also oberhalb der Curie-Temperatur, ist, wie zu erwarten war, keine Spinabhängigkeit mehr vorhanden.



|                                |  |
|--------------------------------|--|
| Besetzungszahl                 | $n = 0.7$  |
| Coulomb-Wechselwirkungsstärken | $U_L = 20 \text{ eV}$<br>$U_R = 4 \text{ eV}$  |
| Hybridisierungsstärken         | $\epsilon_{MI} = 0.5 \text{ eV}$<br>$\epsilon_{RP} = 0.05 \text{ eV}$                        |
| Bandschwerpunkte               | $T_{0,I} = 5 \text{ eV}$<br>$T_{0,R} = T_{0,L} = 0 \text{ eV}$                               |
| Bandbreiten                    | $W_L = 3 \text{ eV}$<br>$W_I = 1 \text{ eV}$<br>$W_R = 2 \text{ eV}$<br>$W_P = 5 \text{ eV}$ |
| Temperatur                     | $T = 0 \text{ K}$  |

Tabelle 5.1: Standardparameter. In allen weiteren Rechnungen werden, sofern nicht anders angegeben, diese Parameterwerte verwendet.

### 5.3 Modellparameter

Eine der Schwierigkeiten bei der numerischen Auswertung des vollständigen Modells liegt darin, dass es sehr viele freie Parameter enthält: zwei Kopplungsstärken  $\epsilon_{MI}$  und  $\epsilon_{RP}$ <sup>1</sup>, vier Bandschwerpunkte, vier Bandbreiten, zwei Coulomb-Wechselwirkungsstärken  $U_L$  und  $U_R$ , die Temperatur  $T$  und schließlich noch die Besetzungszahl  $n$ . Die Bandschwerpunkte sind dabei allerdings nicht vollkommen unabhängig voneinander. Die angelegte Spannung  $V$  führt zu einer Potentialdifferenz  $\mu_L - \mu_P = V$  zwischen den chemischen Potentialen des linken Ferromagneten und des Paramagneten. Wählt man den linken Bandschwerpunkt  $T_{0,L}$  als Energienullpunkt, dann muss der paramagnetische Bandschwerpunkt  $T_{0,P}$  so angepasst werden, dass die obige Beziehung zwischen den Potentialen erfüllt ist. Damit liegen zwei der vier Bandschwerpunkte bereits fest. Insgesamt verbleiben also zwölf Parameter, die alle im Prinzip unabhängig voneinander variiert werden können. Allein aus praktischen Erwägungen wird es daher unerlässlich sein, den Parameterraum einzuschränken. Diese Einschränkung stellt nicht notwendigerweise einen Informationsverlust dar, da natürlich nicht alle Parameterbereiche aus Sicht des Magnetisierungsverhaltens von Interesse sind. Beispielsweise kommen zur Modellierung des strominduzierten Schaltens nur solche Parameter in Frage, für die beide Ferromagnete eine endliche Magnetisierung sowohl in paralleler als auch antiparalleler Ausrichtung aufweisen. Es wird sich zeigen, dass bereits diese offensichtliche Forderung den Parameterbereich deutlich einschränken wird. Für die Rechnungen in den folgenden Abschnitten wurden, sofern nicht anders angegeben, die Parameterwerte aus Tabelle 5.1 benutzt.

Die Berechnung der Magnetisierung geht folgendermaßen vonstatten. Zunächst werden

<sup>1</sup>Wie bereits bei der Diskussion der Hybridisierung in Abschnitt 3.2 erwähnt, wird zur numerischen Auswertung angenommen, dass die Tunnelkopplungen wellenzahlunabhängig sind, d.h.  $\epsilon_{\mathbf{k}_M \mathbf{k}_X} \equiv \epsilon_{MX}$ .

## 5 Numerische Resultate

alle Modellparameter vorgegeben und die Spannung  $V$  auf Null gesetzt. Dann werden das chemische Potential  $\mu_L$  des linken Ferromagneten und das vorläufige Potential  $\hat{\mu}_P$  des Paramagneten über die Bedingungen

$$n \stackrel{!}{=} \langle n_{X,\uparrow} \rangle + \langle n_{X,\downarrow} \rangle \quad (X = L, P) \quad (5.2)$$

mit

$$\langle n_{X,\sigma} \rangle = -\frac{1}{N\pi} \sum_{\mathbf{k}_X} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_X(E) \text{Im} g_{\mathbf{k}_X\sigma}^r(E) \quad (5.3)$$

selbstkonsistent bestimmt. Die (Gleichgewichts-)Greenfunktionen  $g_{\mathbf{k}_X\sigma}^r(E)$  sind dabei durch die Gleichungen (3.31) und (3.25) gegeben und die chemischen Potentiale gehen durch die Fermi-Funktionen  $f_X(E)$  ein. Die Besetzungszahlen im Paramagnet sind natürlich nicht spinabhängig, daher könnte dort der Index  $\sigma$  auch unterdrückt werden. Der linke Ferromagnet wird, abgesehen von Abschnitt 5.9, in Mean Field-Näherung beschrieben. Seine Selbstenergie lautet also  $\Sigma_{\mathbf{k}_L\sigma}^r(E) = U_L \langle n_{L,-\sigma} \rangle$ . Anschließend wird der Bandschwerpunkt des Paramagneten um  $\mu_L - \hat{\mu}_P$  verschoben. Damit ergibt sich der neue Bandschwerpunkt und das neue chemische Potential:

$$T_{0,P} = \hat{T}_{0,P} + \mu_L - \hat{\mu}_P \quad (5.4)$$

$$\mu_P = \hat{\mu}_P + \mu_L - \hat{\mu}_P = \mu_L, \quad (5.5)$$

wobei  $\hat{T}_{0,P}$  ein beliebig vorgegebener Wert für den paramagnetischen Bandschwerpunkt ist. Die Verschiebung stellt also offensichtlich sicher, dass die Potentialdifferenz für  $V = 0$  verschwindet. Mit den neuen Größen  $T_{0,P}$  und  $\mu_P$  können nun die retardierten und kleineren Tunnelselbstenergien berechnet werden. Als letzten Schritt müssen die spinabhängigen Besetzungszahlen des rechten Ferromagneten noch selbstkonsistent aus der kleineren rechten Greenfunktion bestimmt werden. Dazu werden Startwerte für die Besetzungszahlen  $\langle n_{R,\sigma} \rangle$  und die Bandkorrektur  $B_\sigma$  benötigt. Für letztere genügt als Ausgangswert üblicherweise die Wahl  $B_\sigma = 0$ . Weiterhin muss unterschieden werden, ob man parallele oder antiparallele Orientierung der beiden Magnetisierungen modellieren möchte. Je nach Orientierung müssen nämlich unterschiedliche Startwerte für die Selbstkonsistenzschleife gewählt werden. Die Orientierung bezieht sich dabei auf die Spinprojektionsachse des linken Ferromagneten. Dessen Majoritätsspins werden im Folgenden Spin Up genannt. Damit besitzt er also immer eine positive Magnetisierung  $m_L = \langle n_{L,\uparrow} \rangle - \langle n_{L,\downarrow} \rangle \geq 0$ . Der rechte Ferromagnet ist genau dann parallel zum linken orientiert, falls seine Magnetisierung  $m_R$  ebenfalls positiv ist. Entsprechend ist er antiparallel ausgerichtet, wenn  $m_R < 0$  ist. Daher bieten sich folgende Startwerte an:

$$\begin{aligned} \langle n_{R,\uparrow} \rangle &= n, \langle n_{R,\downarrow} \rangle = 0 && \text{parallele Orientierung} \\ \langle n_{R,\uparrow} \rangle &= 0, \langle n_{R,\downarrow} \rangle = n && \text{antiparallele Orientierung} \end{aligned}$$

Die erste Wahl stellt sicher, dass Spin Up Majoritätsspinrichtung im rechten Ferromagneten wird, während bei der zweiten Wahl Spin Down-Elektronen Majoritätselektronen sein werden. Dies gilt natürlich nur, sofern für den betrachteten Parametersatz die ent-

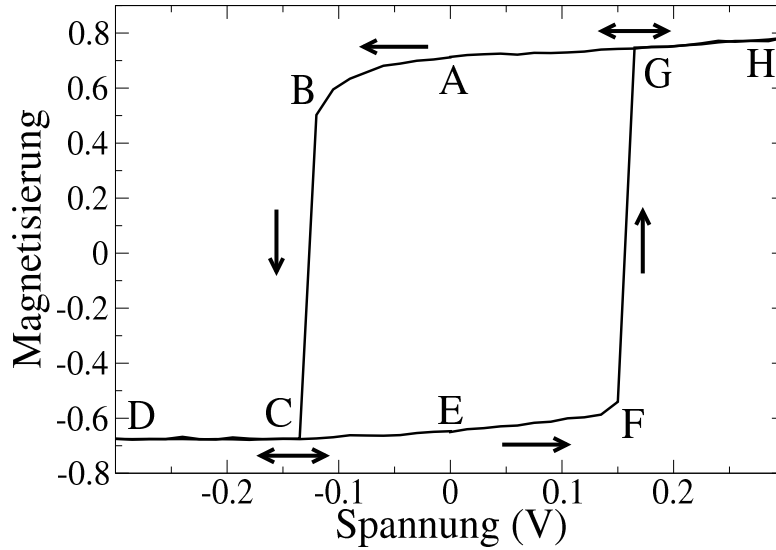


Abbildung 5.7: Numerische Berechnung der Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der angelegten Spannung. Die Pfeile kennzeichnen, in welche Richtung die Spannung geändert wurde. Parameter aus Tab. 5.1.

sprechende Magnetisierung überhaupt stabil ist.

In anderen Arbeiten wurde festgestellt, dass strominduziertes Schalten nur in Anwesenheit einer Anisotropie möglich ist [65]. Zwar ist im Modell-Hamilton-Operator (3.2) kein expliziter Anisotropieterm vorhanden. Durch die Vorgabe der Startwerte erhält der Ferromagnet aber trotzdem eine Vorzugsrichtung für die Orientierung der Magnetisierung. Dies entspricht letztlich der Wirkung einer Anisotropie, die somit auch im vorliegenden Modell zumindest indirekt vorhanden ist.

## 5.4 Strominduziertes Schalten der Magnetisierung

Die Hauptaufgabe der vorliegenden Arbeit liegt in der mikroskopischen Modellierung von strominduziertem Schalten der Magnetisierung. In diesem Abschnitt soll die zentrale Frage beantwortet werden, ob das vorgeschlagene Modell tatsächlich in der Lage ist, dies zu erreichen. In Abb. 5.7 ist dazu eine typische Magnetisierungskurve als Funktion der anliegenden Spannung gezeigt. Die Berechnung wurde mit paralleler Ausrichtung der beiden Magnetisierungen gestartet (Punkt A). Es wurde eine negative Spannung angelegt, wodurch der rechte Ferromagnet im Vergleich zum linken zu höheren Energien geschoben wurde (vgl. die QDOS in Abb. 5.8). Die Magnetisierung nimmt stetig ab, bis sie einen kritischen Punkt B erreicht, wo sie abrupt ihr Vorzeichen ändert. Damit ist das System von paralleler zu antiparalleler Orientierung übergegangen (C). Ein weiteres Erniedrigen der Spannung bis zu Punkt D hat keinen wesentlichen Effekt auf die Größe der Magnetisierung. Wird nun die Spannung wieder zurückgefahren, folgt die Magnetisierung zunächst der vorigen Kurve bis zum Schaltpunkt C. Dort geht sie allerdings

nicht wieder in den parallelen Zustand über, sondern bleibt negativ, selbst wenn die Spannung komplett abgeschaltet wird (E). An dieser Stelle kehrt sich das Vorzeichen der Spannung um, d.h. der rechte Ferromagnet wird, verglichen mit dem linken, zu niedrigeren Energien verschoben. Für kleine Spannungen erkennt man einen leichten Anstieg der Magnetisierung bis zu einem zweiten kritischen Punkt F. Dort springt das System zurück in seinen ursprünglichen Zustand mit paralleler Ausrichtung. Der Spannungswert an Punkt F stimmt ungefähr mit dem des ersten kritischen Punkts B überein, allerdings natürlich mit umgekehrtem Vorzeichen. Nachdem das System in den parallelen Zustand zurückgekehrt ist, hat auch eine weiter erhöhte Spannung keinen wesentlichen Einfluss mehr auf die Magnetisierung (G bis H). Anschließend wird die Spannung abgeschaltet und das System befindet sich wieder im Ausgangspunkt A. Somit ist es möglich, durch Anlegen einer Spannung mit geeignetem Vorzeichen kontrolliert zwischen den beiden Zuständen mit paralleler und antiparalleler Ausrichtung hin und her zu schalten. Zum Beweis, dass es sich bei diesem Phänomen tatsächlich um strominduziertes Schalten handelt, wird das System erneut in Punkt A präpariert. Nun wird aber, im Gegensatz zu oben, eine positive Spannung angelegt. Dadurch wird das System reversibel zwischen den Punkten A und H wandern. Insbesondere findet keine Umkehrung der Magnetisierungsrichtung statt. Ein ähnliches Verhalten ergibt sich, wenn man in Punkt E startet und eine negative Spannung anlegt. Dann bewegt sich die Magnetisierung zwischen den Punkten D und E ohne ihr Vorzeichen zu wechseln. Daher muss man schließen, dass der Übergang parallel zu antiparallel nur für negative Spannungen und der umgekehrte Übergang antiparallel zu parallel nur für positive Spannungen möglich ist. Dieser Aspekt ist deswegen entscheidend, weil dadurch klar zwischen zwei möglichen physikalischen Ursachen des Schaltens unterschieden werden kann [16]. In diesem Fall muss die Spinpolarisation des Stroms nämlich eine entscheidende Rolle spielen, da sich nur so diese Asymmetrie bezüglich der Spannung erklären lässt, wie im Folgenden noch detaillierter diskutiert werden wird. Alternativ dazu könnte das Schalten nämlich auch eine Konsequenz des durch den Strom verursachten Magnetfelds sein. Allerdings müssten die Magnetisierungskurven dann symmetrisch sein, d.h. der Übergang parallel zu antiparallel sollte sich beispielsweise auch für positive Spannungen beobachten lassen [121, 122]. Das asymmetrische Verhalten stellt somit eines der wesentlichen Kennzeichen von strominduziertem Schalten dar [10, 48] und daher ist das vorgeschlagene Modell in der Tat in der Lage diesen Effekt zu simulieren.

Mit Hilfe der Quasiteilchenzustandsdichten der beiden Ferromagnete und den Erkenntnissen, die in Abschnitt 5.1 über die Hybridisierung gewonnen wurden, lässt sich erklären, warum das Modell diese Ergebnisse liefert [123]. Dazu sind in Abb. 5.8 die Zustandsdichten für beide Orientierungen dargestellt. Da der linke Ferromagnet in Mean Field-Näherung mit großem  $U_L = 20$  eV modelliert wurde, ist nur der Spin Up-Anteil in dem Bild zu sehen. Die Spin Down-Bänder liegen nämlich etwa bei  $U_L n_{\uparrow} = 14$  eV und spielen für das Verhalten der Magnetisierung des rechten Ferromagneten daher keine Rolle. Dessen QDOS besteht sowohl aus Spin Up- als auch aus Spin Down-Anteilen, deren Form und Lage eine Konsequenz der NSDA sind. Die Aufspaltung in oberes und unteres Hubbard-Band bei  $E \approx 0$  eV und  $E \approx U_R = 4$  eV ist deutlich erkennbar. Bei  $E \approx T_{0,I} = 5$  eV liegen die, durch den Isolator verursachten, Hybridisierungszustän-

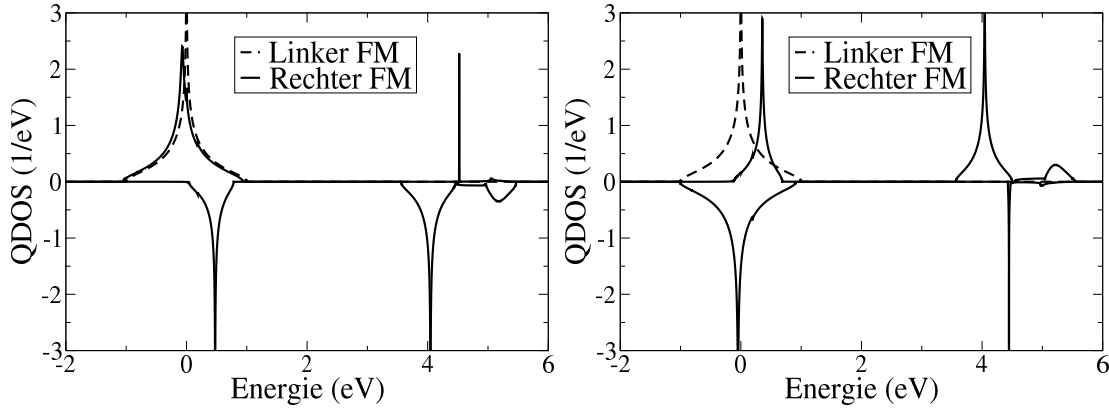


Abbildung 5.8: Quasiteilchenzustandsdichten zweier Ferromagnete ohne anliegende Spannung. Das linke Bild zeigt parallele, das rechte Bild antiparallele Orientierung der beiden Magnetisierungen (Punkte A bzw. E in Abb. 5.7). Die durchgezogene Linie ist die QDOS des rechten Ferromagneten in NSDA-, die gestrichelte Linie die des linken Ferromagneten in Mean Field-Näherung. Das linke Spin Down-Band ist nicht gezeigt. Parameter aus Tab. 5.1.

de. Zunächst soll der Fall paralleler Ausrichtung (linkes Bild) mit positiver anliegender Spannung  $V > 0$  diskutiert werden. Da der linke Ferromagnet nicht durch die Spannung beeinflusst wird, wird seine QDOS für alle  $V$  dieselbe bleiben. Beide Spinbänder des rechten Ferromagneten werden dagegen zu niedrigeren Energien verschoben. Die Hybridisierung zwischen den Bändern wirkt abstoßend, wobei sie allerdings nur zwischen Bändern derselben Spinrichtung besteht. Damit wird das Spin Up-Band des rechten Ferromagneten zusätzlich nach unten geschoben, während die Hybridisierung keinen Einfluss auf das Spin Down-Band hat. Daher wird die Spin Up-Besetzungszahl  $\langle n_{R,\uparrow} \rangle$  zu Lasten der Spin Down-Besetzungszahl  $\langle n_{R,\downarrow} \rangle$  vergrößert. Die Magnetisierung  $m_R = \langle n_{R,\uparrow} \rangle - \langle n_{R,\downarrow} \rangle$  wird durch eine positive Spannung somit erhöht. Dieser Effekt wird durch den Strom noch verstärkt. Für positive Spannungen wird er nämlich von links nach rechts fließen. Da der linke Ferromagnet vollständig polarisiert ist, werden somit nur Spin Up-Elektronen in den rechten Ferromagneten tunneln können. Dies sind die Gründe für das leichte Ansteigen der Magnetisierung zwischen den Punkten A und H in Abb. 5.7 und gleichzeitig auch eine Erklärung, warum die Magnetisierung sich in diesem Fall nicht umkehren kann.

Im umgekehrten Fall, d.h. mit negativer Spannung  $V < 0$ , werden die rechten Spinbänder zu höheren Energien verschoben. Die Abstoßung zwischen den Spin Up-Bändern aufgrund der Hybridisierung führt nun erneut dazu, dass das Spin Up-Band im Vergleich zum Spin Down-Band etwas stärker verschoben wird, in diesem Fall allerdings zu größeren Energien. Damit rutschen die beiden Spinbänder insgesamt näher zusammen, wodurch die Magnetisierung abgeschwächt wird. Wenn nun die Hybridisierung ausreichend stark ist, so reicht diese Verschiebung zusammen mit der selbstkonsistenten Berechnung aus, um das Spin Up-Band über das Spin Down-Band zu schieben. Damit wechselt die

Magnetisierung ihr Vorzeichen. Die Selbstkonsistenz ist dabei entscheidend, da der Hybridisierungseffekt alleine nicht in der Lage wäre, die Bänder so stark zu verschieben (zumindest für realistische Hybridisierungsstärken). Durch die selbstkonsistente Berechnung hängt die Besetzungszahl des einen Bands von der des anderen ab und dadurch kommt es zu einer Art Rückkopplungseffekt, der letztlich die Ursache für das beobachtete Verhalten ist. Auch in diesem Fall wird der Strom diesen Effekt noch verstärken. Für negative Spannungen fließt er von rechts nach links. Da im linken Ferromagnet in der Nähe des chemischen Potentials nur Spin Up-Zustände zum Hineintunneln zur Verfügung stehen, wird der Strom erneut lediglich aus Spin Up-Elektronen bestehen. Diese verlassen den rechten Ferromagneten, womit seine Spin Up-Besetzungszahl zusätzlich schrumpft.

Der Fall antiparalleler Ausrichtung (rechtes Bild in Abb. 5.8) kann auf ähnliche Weise verstanden werden. Der offensichtlichste Unterschied zur parallelen Orientierung ist, dass der Schwerpunkt des unteren Spin Down-Bands des rechten Ferromagneten nun unterhalb des Spin Up-Schwerpunkts liegt. Dies ist natürlich der Grund für die negative Magnetisierung, außerdem aber auch Ursache des umgekehrten Verhaltens bezüglich der angelegten Spannung. In diesem Fall kann eine negative Spannung den Bandschwerpunkt des Spin Up-Bands nicht unter das Spin Down-Band schieben. Ganz im Gegenteil wird das Spin Up-Band durch die Hybridisierung sogar zu noch höheren Energien geschoben, wodurch die Magnetisierung weiter stabilisiert wird, was in Abb. 5.7 zwischen den Punkten E und D auch tatsächlich beobachtet wird. Für positive Spannungen wird das rechte Spin Up-Band unter das linke Spin Up-Band geschoben, daher wird es durch die Abstoßung aufgrund der Hybridisierung im Vergleich zum Spin Down-Band noch stärker nach unten geschoben. Falls die Hybridisierung wiederum genügend groß ist, reicht diese zusätzliche Verschiebung aus, um die beiden Spinbänder umzukehren, so dass die Magnetisierung ihr Vorzeichen ändert. Damit kann also das Verhalten der Magnetisierung in Abhängigkeit der Spannung vollständig anhand der Quasiteilchenzustandsdichten verstanden werden. Der Strom hat für antiparallele Orientierung dieselbe Wirkung wie im bereits diskutierten parallelen Fall. Positive Spannungen führen also zu einem Zufließen von Spin Up-Elektronen, wodurch die negative Magnetisierung geschwächt wird. Umgekehrt fließen Spin Up-Elektronen für negative Spannungen ab, was zu sinkender Magnetisierung führt. Betragsmäßig steigt sie also an. Erneut wird der Hybridisierungseffekt also durch den Strom unterstützt.

Jede Theorie muss sich letztlich im Vergleich mit dem Experiment beweisen. Dazu ist in Abb. 5.9 das Resultat einer experimentellen Widerstandsmessung von Huai *et al.* [124] dargestellt. Die Autoren verwendeten eine Tunnelstruktur bestehend aus Ta<sub>2</sub>/NiFeCr<sub>3.5</sub>/PtMn<sub>14</sub>/CoFe<sub>2</sub>/Ru<sub>8</sub>/CoFe<sub>2.2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/CoFe<sub>1</sub>/NiFe<sub>2</sub>/Ta<sub>5</sub>, wobei die Zahlen die Dicke der jeweiligen Schicht in nm angeben. Die Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Schicht stellt den Isolator dar und die beiden angrenzenden CoFe-Regionen sind die beiden, in der Theorie betrachteten Ferromagnete. Die rechte CoFe-Schicht ist dabei der zu schaltende Magnet, was anhand der Schichtdicken erkannt werden kann, da sie weniger als halb so dick wie die linke Schicht ist. Im Experiment wird die Magnetisierung typischerweise indirekt unter Zuhilfenahme des bereits in der Einleitung erwähnten Riesenmagnetowiderstandseffekts gemessen. Dieser hat zur Folge, dass die parallele Ausrichtung der Magnetisierung einen

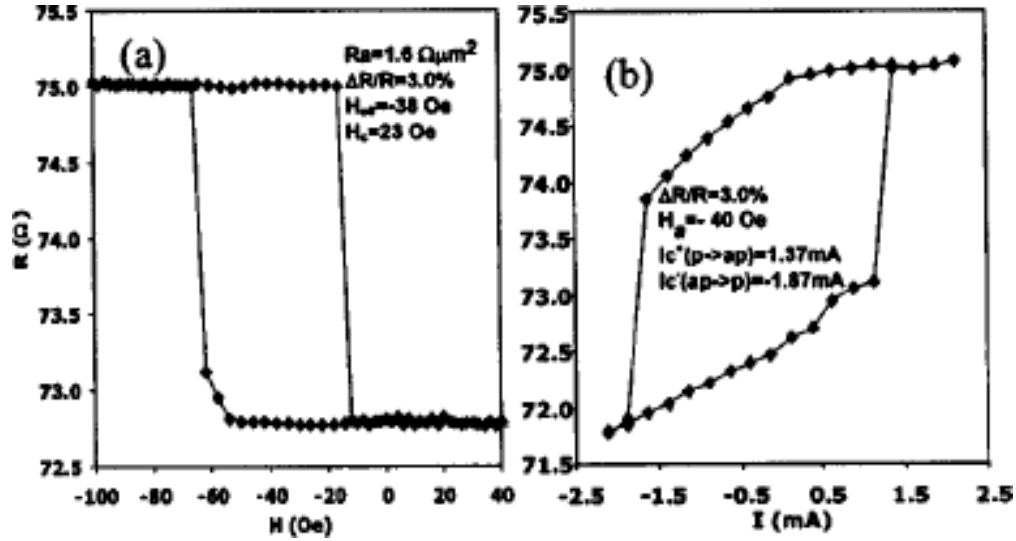


Abbildung 5.9: Von Huai *et al.* [124] experimentell gemessene Widerstandskurven einer magnetischen Tunnelstruktur. Links (a) in Abhängigkeit des äußeren Magnetfelds  $H$ , rechts (b) in Abhängigkeit des anliegenden Stroms  $I$ .

geringen und die antiparallele Ausrichtung einen hohen Widerstandswert besitzt. Im linken Bild (a) ist dazu die Abhängigkeit des Widerstands von dem angelegten äußeren Magnetfeld dargestellt. Wird das Feld  $H$  parallel zur Spinrichtung des gepinnten Ferromagneten angelegt, besitzt das System einen Widerstand von  $R \approx 73 \Omega$ . Dreht man die Richtung des Feldes um, richten sich die Magnetisierungen antiparallel aus und der Widerstand steigt auf  $R \approx 75 \Omega$ . Der Unterschied der Widerstände zwischen den beiden Orientierungen beträgt in diesem Fall also  $\Delta R \approx 2 \Omega$ , wodurch die beiden Phasen in der Abbildung deutlich zu unterscheiden sind. Durch einen Vergleich mit den Widerstandswerten der stromabhängigen Widerstandskurve im rechten Bild, kann der obere Ast der Hysterese mit antiparalleler, der untere mit paralleler Ausrichtung identifiziert werden. Außerdem haben die Autoren eine andere Konvention für die Stromrichtung verwendet. In diesem Fall wird der Strom positiv gezählt, wenn er vom freien zum gepinnten Ferromagneten, also im Modell von rechts nach links, fließt. Um die experimentelle Widerstandskurve mit der theoretischen Magnetisierungskurve vergleichen zu können, müsste man das Bild also sowohl an der  $I$ - als auch an der  $R$ -Achse spiegeln. Aufgrund der Symmetrie der Hysteresekurve würde die dadurch entstehende Kurve aber praktisch wieder genauso aussehen wie in Abb. 5.9, daher ist auch ein direkter Vergleich dieser Abbildung mit dem theoretischen Resultat in Abb. 5.7 angebracht.

Offenbar stimmen beide Bilder qualitativ gut überein. Ein negativer Strom führt in beiden Fällen zu einer abfallenden Magnetisierung, während ein positiver Strom sie steigert.

<sup>2</sup>Dass die Hysteresekurve nicht symmetrisch um  $H = 0$  liegen, wird von den Autoren auf die Néel-Kopplung (auch orange-peel coupling genannt) zurückgeführt [125, 126]. Da die magnetfeldabhängigen Kurven im Weiteren keine Rolle mehr spielen, soll auf diesen Effekt nicht näher eingegangen werden.

Die kritischen Spannungen (Ströme), die zum Schalten nötig sind, stimmen für beide Orientierungen größenordnungsmäßig überein, wobei der Übergang parallel zu antiparallel bei etwas geringeren Spannungen (Strömen) erfolgt. Dies wurde auch bei der theoretischen Kurve beobachtet. Die im Experiment benötigten kritischen Spannungen liegen in der Größenordnung  $V_c \lesssim 0.5$  V, d.h. auch sie stimmen mit den theoretischen Werten überein [19]. Das Modell ist also in der Lage auf selbstkonsistente Weise innerhalb eines mikroskopischen Bildes strominduziertes Schalten in Übereinstimmung mit dem Experiment zu reproduzieren und anhand allgemeiner Eigenschaften der Hybridisierung auch zu erklären. Natürlich tritt das hier beobachtete Hystereseverhalten nicht für alle Parameterkombinationen auf. Im den nächsten Abschnitten soll daher systematisch untersucht werden, welchen Einfluss die verschiedenen Modellparameter auf das Schalten haben.

## 5.5 Stromberechnung

In diesem Abschnitt wird der durch Gl. (3.79) und die Ausdrücke (3.75) bis (3.78) gegebene Tunnelstrom numerisch ausgewertet. Vorher soll allerdings noch die Frage beantwortet werden, wie genau das vorgestellte Modell eigentlich in der Lage ist, das Tunneln über einen Hybridisierungsterm zu beschreiben. Dies ist anhand der Quasiteilchenzustandsdichten in Abb. 5.10 sehr gut erkennbar. Durch die Kopplung mit dem linken Ferromagneten werden die, bei  $T_{0,I} = 5$  eV liegenden, Isolatorbänder leicht gegeneinander verschoben. Entscheidend für den Stromfluss ist allerdings, dass der Isolator durch die Hybridisierung im Bereich des linken Ferromagneten, also unterhalb des chemischen Potentials, endliche Zustandsdichte aufweist. Sie ist zwar nicht sehr groß für die gewählte Hybridisierungsstärke von  $\epsilon_{MI} = 0.5$  eV, im Inset jedoch deutlich zu erkennen. Diese neuen Zustände führen dazu, dass der Isolator eine kleine, aber endliche Besetzung zeigt, wodurch er im Quasiteilchenbild streng genommen zu einem (schlechten) Metall wird. Das Tunneln von Elektronen wird innerhalb des Modells also durch einen direkten Strom von Quasiteilchen simuliert. Mit ausgeschalteter Hybridisierung verschwinden die unteren Isolatorzustände und ein Stromfluss wird unmöglich.

Bevor die eigentlichen Stromkurven diskutiert werden, sollen zunächst einige der in Abschnitt 3.4 bei der Herleitung der Stromformel gemachten Bemerkungen und Annahmen, wie beispielsweise das Verschwinden der zeitlichen Ableitung der Teilchenzahl  $\langle \dot{N}_R^{\sigma} \rangle = 0$ , überprüft werden. Dazu erweist es sich als nützlich die Integralkerne der Teilströme (3.74) und (3.73) zu betrachten:

$$|j_{RX}(E)| \equiv -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}_R} \text{Im} \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(X),r}(E) \text{Im} G_{\mathbf{k}_R\sigma}^{<}(E) \quad (5.6)$$

$$|j_{XR}(E)| \equiv -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}_R} \text{Im} \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{(X),<}(E) \text{Im} G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) \quad (5.7)$$

Die Ströme erhält man also, indem man diese Größen über die Energie integriert. Sie stellen somit eine Art energieabhängiger Stromdichte dar und geben an, welche Energie



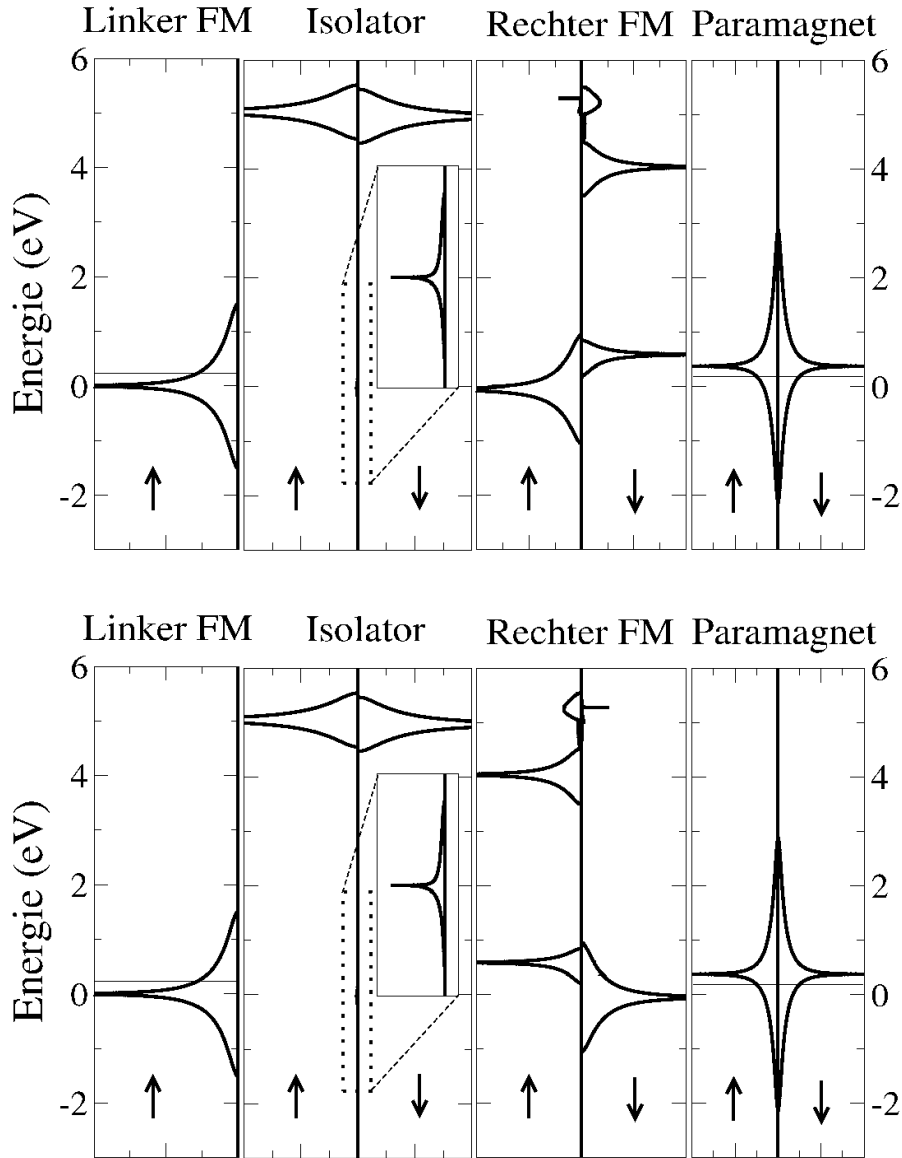


Abbildung 5.10: Quasiteilchenzustandsdichten der einzelnen Regionen ohne anliegende Spannung mit paralleler (oben) bzw. antiparalleler (unten) Ausrichtung der beiden Ferromagnete. Die beiden äußeren Schichten wurden im Gleichgewicht, die inneren im Nichtgleichgewicht berechnet. Der umpunktete Bereich im Isolator ist im Inset zusätzlich vergrößert dargestellt. Es wurden die Standardparameter aus Tab. 5.1 verwendet. Daher ist das Spin Down-Band des linken Ferromagneten nicht sichtbar, da es bei  $E \approx U_L n = 14$  eV liegt. Die dünnen schwarzen Linien kennzeichnen die beiden, in diesem Fall identischen, chemischen Potentiale  $\mu_L$  und  $\mu_P$ . Die Pfeile symbolisieren die jeweilige Spinrichtung.

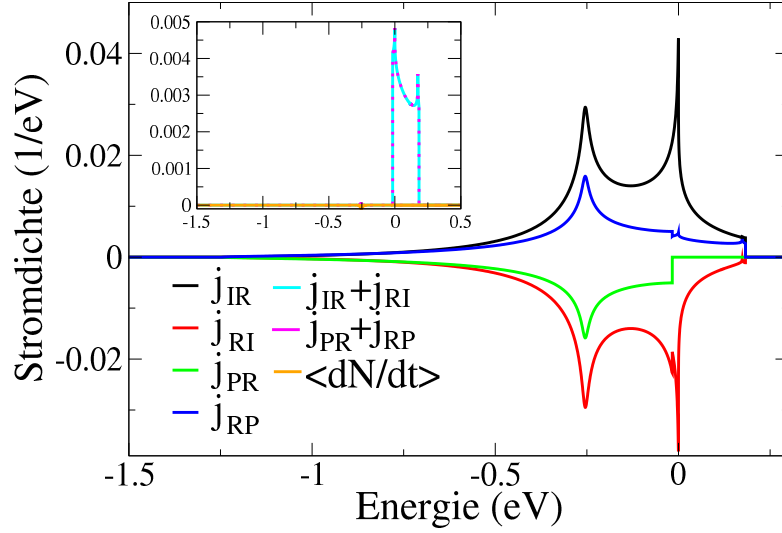


Abbildung 5.11: Energieabhängige Beiträge zum Spin Up-Gesamtstrom. Neben den vier Teilströmen  $j_{IR}$ ,  $j_{RI}$ ,  $j_{PR}$  und  $j_{RP}$  sind im Inset zusätzlich die Ströme  $j_{RP} + j_{PR} = j_{RI} + j_{IR}$  und die zeitliche Ableitung der Teilchenzahl  $\langle \dot{N}_R^\sigma \rangle$  gezeigt. Es wurden die Parameter aus Tab. 5.1 und eine Spannung von  $V = 0.2$  benutzt.

welchen Beitrag zum Gesamtstrom liefert. Auch ihre Vorzeichen müssen, wie die der eigentlichen Ströme, per Hand so angepasst werden, dass nach rechts fließende Ströme positiv und umgekehrt nach links fließende Ströme negativ sind. In Abb. 5.11 sind die vier Stromdichten dargestellt. Aufgrund der starken Spinaufspaltung des linken Ferromagneten besitzt er keine Spin Down-Zustände in der Nähe der Fermienergie, wodurch die Spin Down-Stromdichten alle exakt Null sind. Der Übersichtlichkeit halber sind daher nur die Spin Up-Stromdichten gezeigt. An diesen lassen sich nun eine ganze Reihe von Eigenschaften des Stroms erkennen. Sie sind offenbar eng mit den jeweiligen Quasiteilchenzustandsdichten korreliert. Der linke Ferromagnet hat nämlich in diesem Fall seinen Hauptpeak bei  $E \approx 0$  eV und der rechte bei  $E \approx -0.25$  eV. Bei beiden Energien sind deutliche Maxima in den Stromdichten  $j_{RI}$  und  $j_{IR}$  zu sehen. Damit tragen Regionen mit vielen Zuständen stärker zum Strom bei, wie es natürlich auch naiv zu erwarten war. Weiterhin ist erkennbar, dass bis auf  $j_{PR}$  alle Stromdichten bei  $E \approx 0.18$  eV abbrechen. Genau bei dieser Energie liegt in diesem Fall das linke chemische Potential  $\mu_L$ . Da oberhalb von  $\mu_L$  in keiner der vier Regionen besetzte Zustände existieren, kann dort auch kein Strom fließen.  $j_{PR}$  bricht allerdings schon bei  $E \approx -0.01$  eV ab. Diese Energie stimmt mit dem chemischen Potential des Paramagneten  $\mu_P$  überein. Oberhalb von  $\mu_P$  können natürlich keine Elektronen aus dem Paramagneten in den rechten Ferromagneten tunneln, daher muss die Stromdichte in diesem Fall Null ergeben.

Dass es unterhalb von  $\mu_P$  zu einem endlichen Stromfluss kommt, ist zunächst unerwartet. Nach dem Pauli-Prinzip sollte dies nämlich nicht möglich sein, da sich auf beiden Seiten der Tunnelstruktur nur besetzte Zustände gegenüberliegen. Addiert man die jeweiligen

Teilströme  $j_{RI}$  und  $j_{IR}$  bzw.  $j_{RP}$  und  $j_{PR}$  zusammen, um den Gesamtnettostrom zu erhalten, erkennt man allerdings, dass sich alle Beiträge unterhalb von  $\mu_P$  exakt wegheben. Dies ist im Inset der Abbildung dargestellt. Der Nettostrom erhält also nur Beiträge von solchen Energien, die zwischen den beiden chemischen Potentialen  $\mu_P$  und  $\mu_L$  liegen. Aber was bedeuten die endlichen Stromdichten unterhalb von  $\mu_P$ ? Ein entscheidender Hinweis zur Beantwortung dieser Frage liefert die Tatsache, dass sich die Teilströme in der Summe genau gegenseitig wegheben. Tunnelt ein Elektron nämlich vom linken zum rechten Ferromagneten und *gleichzeitig* tunnelt ein anderes Elektron mit der gleichen Energie in die umgekehrte Richtung, so wird das Pauli-Prinzip nicht verletzt, da zu keinem Zeitpunkt ein Zustand doppelt besetzt ist. Letztlich haben die beiden Ferromagnete lediglich zwei Elektronen ausgetauscht, wodurch diese Ströme durchaus als eine Art „Austauschwechselwirkung“ zwischen den beiden Ferromagneten interpretiert werden können [65]. Sie „fühlen“ sich also selbst dann, wenn kein Nettostrom zwischen ihnen fließt.

Auch die zeitliche Änderung der Teilchenzahl des rechten Ferromagneten  $\langle \dot{N}_R^{\sigma} \rangle$  kann als Integral über die Stromdichten dargestellt werden (vgl. Gl. (3.72)). Sie ist im Inset als orangefarbene Kurve gezeigt. Offenbar ist sie konstant Null, wie es im stationären Fall zu erwarten war. Diese Tatsache wurde bei der Herleitung des Tunnelstroms und auch bei der Ableitung der NSDA mehrfach verwendet. Anhand dieser Kurve konnte sie nun auch numerisch bewiesen werden.

Der Gesamtstrom durch die Tunnelstruktur ist in Abb. 5.12 für zwei verschiedene Werte der Hybridisierung  $\epsilon_{MI}$  und paralleler bzw. antiparalleler Ausrichtung der Magnetisierungen gezeigt. Zum besseren Vergleich ist auch das Magnetisierungsverhalten dargestellt. Aufgrund der Aufspaltung des linken Ferromagneten können, wie bereits mehrfach erwähnt, nur Spin Up-Elektronen tunneln, d.h. der Gesamtstrom  $J = J^{\uparrow} + J^{\downarrow}$  ist mit dem Spin Up-Strom  $J^{\uparrow}$  identisch und der Spin Down-Strom  $J^{\downarrow}$  ist entsprechend Null. Die beiden Hybridisierungsstärken wurden so gewählt, dass im linken Bild noch kein Schalten auftritt, im rechten dagegen schon, wie an den entsprechenden Magnetisierungskurven zu erkennen ist. Zunächst soll der linke Fall diskutiert werden. Ohne anliegende Spannung verschwindet der Strom in beiden Orientierungen. Dies war aufgrund des Pauli-Prinzips zu erwarten. Für kleine Spannungen  $V$  verhält er sich in paralleler Orientierung ungefähr linear, weicht mit wachsender Spannung aber deutlich von der Linearität ab. Eine Linear Response-Theorie wäre also nicht in der Lage, dieses Verhalten korrekt zu modellieren. Ausgehend von  $V = 0$  steigt der Strom für positive Spannungen bis zu einem Maximalwert an, um anschließend für weiter steigende Spannungen wieder auf Null abzufallen. Umgekehrt sinkt er für negative Spannungen bis auf einen Minimalwert ab und geht dann ebenfalls auf Null zurück. Die Vorzeichen des Stroms sind verständlich, da die Vorzeichenkonvention gerade so gewählt wurde, dass positive (negative) Spannungen zu positivem (negativem) Strom führen. In antiparalleler Orientierung ergibt sich für negative Spannungen kein Strom. Für positive Spannungen steigt er hingegen stark bis zu einem Maximalwert bei  $V \approx 0.4$  an, um für höhere Spannungen fast genauso schnell wieder abzufallen. Die Magnetisierung nimmt bei positiven Strömen leicht zu und bei negativen Strömen leicht ab. Offenbar reicht der Zu- bzw. Abfluss von Spin Up-Elektronen nicht aus, um den Ferromagneten umzuorientieren.

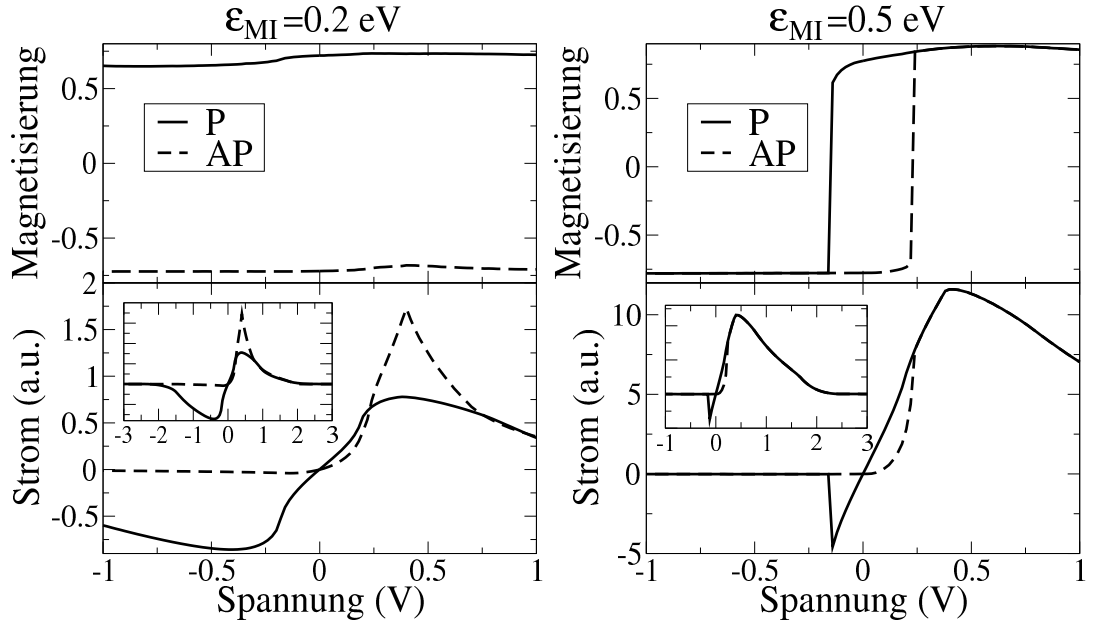


Abbildung 5.12: Strom und Magnetisierung als Funktion der Spannung für zwei verschiedene Hybridisierungsstärken  $\epsilon_{MI}$ . Der Strom ist in willkürlichen Einheiten angegeben. In den Insets ist er über einen größeren Spannungsbereich gezeigt. Im linken Bild ist  $\epsilon_{MI} = 0.2$  eV, im rechten  $\epsilon_{MI} = 0.5$  eV. Die restlichen Parameter wurden aus Tab. 5.1 übernommen.

Das Verhalten des Stroms ist eine unmittelbare Folge aus der Gestalt der entsprechenden Quasiteilchenzustandsdichten in Abb. 5.10. Der Fall paralleler Ausrichtung soll wiederum zuerst diskutiert werden. Das Strommaximum wird bei  $V \approx 0.4$  erreicht. Bei diesem Spannungswert liegen die Maxima der Zustandsdichten des linken Ferromagneten und des Paramagneten genau auf einer Höhe, d.h. es liegen sich eine Maximalzahl an besetzten bzw. unbesetzten Zuständen gegenüber. Bei negativen anliegenden Spannungen schiebt sich das Spin Up-Bandmaximum des rechten Ferromagneten zwischen die beiden Potentiale. Bei  $V \approx -0.4$  liegt eine maximale Zahl von Zuständen in diesem Bereich, wodurch der Strom betragsmäßig maximal wird. Aufgrund des Vorzeichens bildet sich also ein Minimum aus. Anschließend muss der Betrag des Stroms in beiden Spannungsrichtungen abnehmen, da durch die Verschiebung immer weniger Zustände zum Tunneln zur Verfügung stehen. Schließlich muss er bei Spannungen, bei denen die Bänder nicht mehr überlappen, komplett verschwinden. Bei den gewählten Bandbreiten von  $W_L = 3$  eV und  $W_R = 2$  eV wäre dies also bei etwa  $V = 2.5$  der Fall. Dieses Abfallen des Stroms ist letztlich eine Folge des Einbandmodells. In realen Festkörpern würden sich nämlich weitere Bänder ober- bzw. unterhalb der Leitungsbänder anschließen, wodurch es weiterhin zu einer Überlappung kommt und der Strom damit weiter betragsmäßig ansteigen würde. Daher wird in experimentellen oder auf *ab initio*-Methoden beruhenden Stromkurven auch kein negativer differentieller Widerstand  $\frac{dJ}{dV}$  beobachtet [127, 19, 21, 128]. Bis zum Strommaximum verhalten sich die theoretischen Stromkurven aber qualitativ identisch zum Experiment. Damit ist die grundsätzliche Struktur der Stromkurven in paralleler Ausrichtung im linken Bild erklärt.

Die Quasiteilchenzustandsdichten für antiparallele Ausrichtung sind im unteren Bild von Abb. 5.10 dargestellt. Sie stimmen in sehr guter Näherung mit denen der parallelen Orientierung überein, sofern man einfach die Spinrichtungen im rechten Ferromagneten vertauscht. Damit lässt sich unmittelbar erkennen, weshalb für negative Spannungen in diesem Fall kein Strom fließen kann. Offenbar liegt die rechte Spin Up-Zustandsdichte nämlich über den beiden chemischen Potentialen. Da sie mit negativer Spannung weiter nach oben geschoben wird, kann sich an dieser Situation auch nichts ändern, wodurch es nie endliche Spin Up-Zustandsdichte im rechten Ferromagneten *zwischen* den chemischen Potentialen geben wird. Da Elektronen nur in diesem Bereich tunneln können, wird der Stromfluss somit verhindert. Das Verhalten für positive Spannungen kann analog zur parallelen Orientierung erklärt werden. Dadurch dass im rechten Ferromagneten die Spin Up-Zustandsdichte relativ schmal, aber trotzdem hoch ist, ergibt sich der starke Anstieg und anschließende ebenso starke Abfall des Stroms.

Interessanter ist natürlich der Fall im rechten Bild von Abb. 5.12, bei dem Schalten auftritt. Bedingt durch das höhere  $\epsilon_{MI} = 0.5$  eV ist auch der Strom etwa eine Größenordnung stärker als im linken Bild mit  $\epsilon_{MI} = 0.2$  eV. Dies deckt sich mit der experimentellen Beobachtung, dass eine Mindeststromstärke nötig ist, um die Magnetisierung schalten zu können [124]. In paralleler Orientierung mit positiver Spannung verhält sich der Strom wie im bereits diskutierten Fall. Positive Spannung bedeutet einen Zufluss von Spin Up-Elektronen, die natürlich die Magnetisierungsrichtung nicht ändern können, da diese bereits positiv ist. Sie können sie höchstens verstärken, wie anhand der Magnetisierungskurve ersichtlich ist. Für Spannungen oberhalb des Strommaximums nimmt die

Magnetisierung entsprechend wieder leicht ab. Für negative Spannungen fällt der Strom zunächst annähernd linear ab, d.h. es fließen Spin Up-Elektronen aus dem rechten Ferromagneten ab. Dies führt zu einer Schwächung der Magnetisierung. Am Schalterpunkt erkennt man eine abrupte Änderung des Stroms, der plötzlich auf Null, d.h. auf den Wert des antiparallelen Stroms, zurückfällt. Gleichzeitig springt die Magnetisierung von paralleler zu antiparalleler Ausrichtung. Die kritische Stromstärke beträgt etwa  $J_c \approx -5$  (in willkürlichen Einheiten). Der Strom in antiparalleler Orientierung zeigt über einen weiten Spannungsbereich dasselbe Verhalten wie für das kleinere  $\epsilon_{MI}$  im linken Bild. Für negative Spannungen ist er also konstant Null und für positive Spannungen ist ein starker nichtlinearer Anstieg erkennbar. Da der Strom in diesem Fall positiv ist, bedeutet dies einen Zufluss von Spin Up-, also Minoritätselektronen. Daher wird die Magnetisierung geschwächt. Überschreitet der Strom die kritische Stromstärke von  $J_c \approx 5$  wechselt die Magnetisierung ihr Vorzeichen und der weitere Stromverlauf ist mit dem der parallelen Orientierung identisch.

Das Verhalten der Magnetisierung kann also auch anhand des Tunnelstroms verstanden werden. Natürlich sind beide Größen letztendlich aus den Quasiteilchenzustandsdichten bzw. den zugrundeliegenden Greenfunktionen abgeleitet. Daher waren die Stromkurven auch nicht nötig, um das Magnetisierungsverhalten, das im vorhergehenden Abschnitt diskutiert wurde, zu verstehen.

### 5.6 Einfluss der Modellparameter auf das Magnetisierungsverhalten

Um einen ersten Überblick über den Einfluss der verschiedenen Parameter auf das Magnetisierungsverhalten zu bekommen, bietet es sich an, zunächst die Magnetisierung ohne angelegte Spannung zu diskutieren. Die Hybridisierung soll aber bereits angeschaltet sein, d.h. auch wenn in diesem Fall kein Nettostrom durch das System fließt, befindet es sich trotzdem nicht im Gleichgewicht. Dabei muss zwischen paralleler und antiparalleler Ausrichtung der beiden Magnetisierungen unterschieden werden, da beide ein zum Teil durchaus verschiedenes Verhalten zeigen. Um den Einfluss der Parameter zu diskutieren, wird jeweils nur ein einziger von ihnen variiert. Alle anderen werden konstant gehalten, sofern nichts anderes angegeben wird. Nachdem auf diese Weise die interessanten Parameterbereiche bestimmt wurden, soll anschließend die Abhängigkeit der spannungsabhängigen Magnetisierungskurve von den Modellparametern untersucht werden. Von besonderem Interesse ist dabei die Veränderung der kritischen Spannung („Schalterpunkt“), also dem Spannungswert, bei dem es zur Umorientierung der Magnetisierung kommt. Zur Diskussion ihres Verhaltens ist die Hysteresekurve selbst nicht sehr geeignet, da die Darstellungen mit steigender Parameterzahl sehr schnell unübersichtlich werden. Vielmehr bietet sich die Abbildung in Form eines Phasendiagramms an, bei dem zwischen Regionen paralleler und antiparalleler Orientierung unterschieden wird. Als x-Achse wird dabei jeweils der zu untersuchende Parameter gewählt und die Spannung wird entlang der y-Achse aufgetragen (siehe beispielsweise das rechte Bild in Abb. 5.14). Prinzipiell müsste man für jeden Parameter zwei Phasendiagramme angeben, einmal

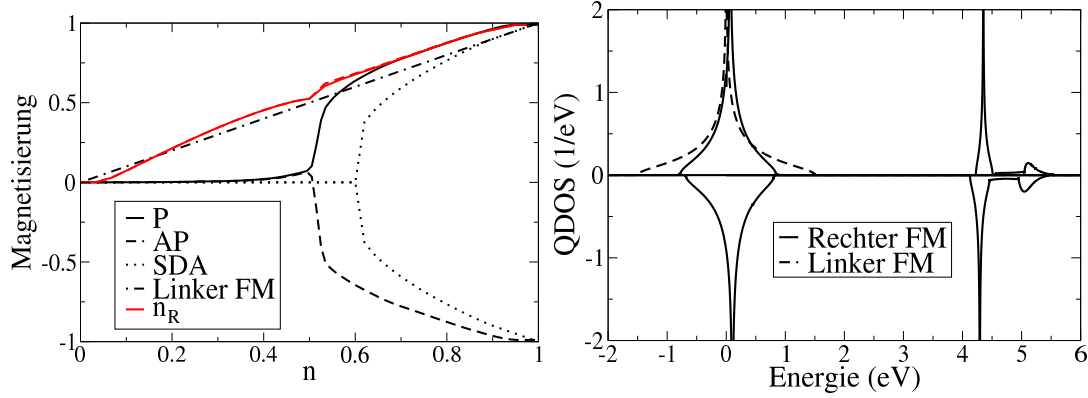


Abbildung 5.13: Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Besetzungszahl  $n$  ohne anliegende Spannung. Die durchgezogene Linie gilt für parallele, die gestrichelte Linie für antiparallele Ausrichtung der Magnetisierungen. Die Besetzungszahl  $n_R$  des rechten Ferromagneten ist als rote Kurve dargestellt. Zusätzlich sind noch die SDA-Magnetisierung und die Magnetisierung des linken Ferromagneten eingezeichnet. Rechts: Quasiteilchenzustandsdichten der beiden Ferromagnete für  $n = 0.5$ . Das Spin Down-Band des linken Ferromagneten ist nicht gezeigt. Parameter aus Tab. 5.1.

ausgehend von paralleler Orientierung (Punkt A in Abb. 5.7) und einmal für antiparallele Ausrichtung (Punkt E in Abb. 5.7). Andererseits wären die Darstellungen für jeweils eine Spannungshalbachse trivial. Ausgehend von paralleler Orientierung sind positive Spannungen beispielsweise niemals in der Lage die Magnetisierungsrichtung zu ändern. Das Phasendiagramm besteht in diesem Bereich also grundsätzlich nur aus einer Phase. Umgekehrt gilt dasselbe bei antiparalleler Orientierung und negativer Spannung<sup>3</sup>. Daher würde in den beiden Phasendiagrammen die obere bzw. untere Hälfte immer nur aus einer einzigen Phase bestehen. Es bietet sich somit an, beide Phasendiagramme in ein einziges zusammenzulegen, indem man die uninteressanten, weil einphasigen, Bereiche weglässt. In dem dadurch entstehenden Phasendiagramm bedeuten positive Spannungen, dass man von antiparalleler Orientierung ausgeht, und umgekehrt gelten die Phasen für negative Spannungen ausgehend von paralleler Ausrichtung.

Weiterhin wird bei der Diskussion natürlich auch immer versucht auf experimentelle Ergebnisse und ihren Zusammenhang zu den theoretischen Resultaten einzugehen. Allerdings werden die meisten Tunnelstrukturen aus denselben Materialien konstruiert. Daher ist bei vielen Parametern nicht bekannt, wie sich ihre Änderung auf das Schaltverhalten auswirkt.

### 5.6.1 Besetzungszahl $n$

Die Besetzungszahl hat großen Einfluss auf die Magnetisierung, wie im linken Bild von Abb. 5.13 zu erkennen ist. Für sehr kleine Besetzungszahlen ist die Magnetisierung für beide Orientierungen praktisch Null. Mit steigender Besetzungszahl bildet sich unabhängig vom Startwert der Selbstkonsistenzschleife eine geringe, positive Magnetisierung aus. Bei  $n \approx 0.5$  kommt es zu einem starken Anstieg der parallelen Magnetisierung. Gleichzeitig wird die antiparallele Ausrichtung stabil und nimmt ebenfalls betragsmäßig deutlich zu. Mit weiter steigender Besetzungszahl zeigen beide Orientierungen Sättigungsverhalten und streben gegen  $|m_R| = n = 1$ .

Zur Erklärung dieses Verhaltens bietet sich der Vergleich mit der Magnetisierung der SDA einerseits und des linken Ferromagneten andererseits an. Letzterer befindet sich für die gewählten Parameter  $U_L/W_L \approx 6.66$  im sogenannten Strong Coupling-Bereich. Die Stoner-Lösung liefert daher für alle, von Null verschiedenen, Besetzungszahlen stabilen Magnetismus. Für die linke Magnetisierung ergibt sich daher eine Gerade in Abhängigkeit der vorgegebenen Besetzungszahl, d.h. der Ferromagnet ist durchgehend in der Sättigung  $m_L = n$ . Die SDA (gepunktete Linie) liefert andererseits offensichtlich erst oberhalb einer kritischen Besetzungszahl von  $n \approx 0.6$  eine endliche Magnetisierung. Die Existenz einer solchen kritischen Besetzungszahl wurde in Abschnitt 5.2 bereits begründet. Auch die NSDA zeigt daher qualitativ ein solches Verhalten. Für zu kleine Besetzungszahlen ist der rechte Ferromagnet somit noch nicht in der Lage von sich aus eine endliche Magnetisierung zu erzeugen. Lediglich die Hybridisierung mit dem linken, voll polarisierten Ferromagneten sorgt für einen leichten Überschuss an Spin Up-Elektronen und somit eine positive Magnetisierung. Im rechten Bild der Abbildung sind die Quasiteilchenzustandsdichten der beiden Ferromagnete für eine Besetzungszahl von  $n = 0.5$  dargestellt. Man erkennt, dass die Spinbänder des rechten Ferromagneten leicht gegeneinander verschoben sind. Diese Verschiebung wird durch die Abstoßung zwischen den Spin Up-Bändern der beiden Ferromagnete verursacht und führt zu der beobachteten kleinen, aber endlichen, Magnetisierung. Da beide Spin Up-Bänder ungefähr bei derselben Energie liegen, führt die Abstoßung zu einer Verlagerung von spektralem Gewicht weg vom gemeinsamen Bandschwerpunkt. Spin Up-Zustände, die unterhalb des Schwerpunkts liegen, werden zu tieferen, Zustände oberhalb zu höheren Energien verschoben. Daher wird das Spin Up-Band insgesamt etwas breiter als das Spin Down-Band, wie in der Abbildung zu erkennen ist, und die Symmetrie zwischen beiden Bändern ist somit gebrochen.

Ab  $n \approx 0.5$  zeigt die NSDA von sich aus spontanen Ferromagnetismus. Erst ab dieser kritischen Besetzungszahl ist auch negative Magnetisierung, d.h. antiparallele Ausrichtung der beiden Ferromagnete, möglich. Verglichen mit der SDA stabilisiert sich die Magnetisierung also bereits bei geringeren Besetzungszahlen. Dabei muss jedoch beachtet werden, dass die vorgegebene Besetzungszahl  $n$  nur für die beiden Kontakte, also den linken Ferromagneten und den Paramagneten gilt. Die Besetzungszahl  $n_R$  des rechten Ferromagneten (rote Kurve in der Abb.) ist eine Folgerung daraus und daher nicht fixiert. Wenn sie tatsächlich mit der vorgegebenen Besetzungszahl übereinstimmen wür-

<sup>3</sup>Mit einer wichtigen Ausnahme, die in Abschnitt 5.6.2 näher diskutiert wird.



## 5.6 Einfluss der Modellparameter auf das Magnetisierungsverhalten

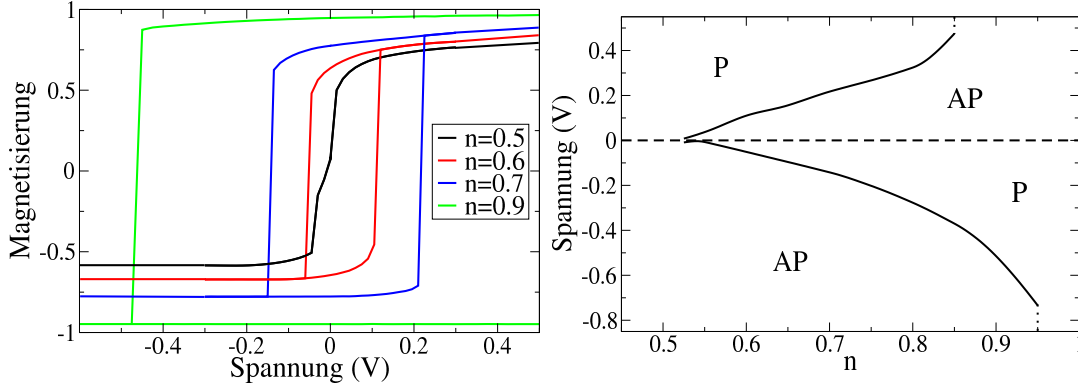


Abbildung 5.14: Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve des rechten Ferromagneten für verschiedene Bandbesetzungen  $n$ . Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von der Bandbesetzung. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1.

de, müsste sie auf einer Geraden, die mit der linken Magnetisierung identisch ist, liegen. Dies ist offensichtlich nicht der Fall: für kleine  $n$  ist die rechte Besetzungszahl  $n_R$  geringer und ab  $n \approx 0.2$  ist sie größer als die vorgegebene Besetzungszahl. Insbesondere gilt  $n_R \approx 0.55$  bei der kritischen Besetzung  $n \approx 0.5$ . Daher ist der Unterschied der kritischen Besetzungszahlen von SDA und NSDA geringer, als es auf den ersten Blick den Anschein hat. Oberhalb der kritischen Besetzungszahl verhält sich die NSDA-Magnetisierung für beide Orientierungen qualitativ wie die SDA. Sie geht jedoch schneller in die Sättigung über, was wiederum eine Folge der höheren Besetzungszahl  $n_R > n$  ist.

Im linken Bild von Abb. 5.14 sind die spannungsabhängigen Magnetisierungskurven für verschiedene Werte der Besetzungszahl dargestellt. Ohne anliegende Spannung existiert für  $n = 0.5$  in beiden Orientierungen nur eine geringe positive Magnetisierung (vgl. Abb. 5.13). Endliche Spannungen führen allerdings zu deutlich größeren Magnetisierungswerten. Dabei verursacht eine positive (negative) Spannung immer eine positive (negative) Magnetisierung, wie in der Abbildung zu erkennen ist. Dieses Verhalten ist unabhängig von der Ausgangssituation, d.h. es ist egal ob von paralleler oder antiparalleler Orientierung ausgegangen wird. Beide Kurven liegen exakt übereinander. Die Erklärung dieses Verhaltens erfolgt analog zur Diskussion der Hysteresekurve, da die Magnetisierungskurve letztlich einer Hysteresekurve mit übereinanderliegenden Ästen entspricht. Es konnte bereits erklärt werden, dass positive Spannungen durch den Strom und den Abstoßungseffekt aufgrund der Hybridisierung immer zu steigender Magnetisierung führen. Negative Spannungen werden die Magnetisierung dagegen senken.

Für höhere Bandbesetzungen von  $n = 0.6$  bzw.  $n = 0.7$  entsteht das in Abschnitt 5.4 diskutierte Hystereseverhalten. Die kritische Spannung, die zum Schalten benötigt wird, nimmt dabei mit steigendem  $n$  in beiden Orientierungen zu. Bei noch höherem  $n = 0.9$  gibt es offenbar nur noch den Übergang von paralleler zu antiparalleler Ausrichtung bei negativen Spannungen. Die antiparallele Orientierung ist dagegen für beliebig hohe an-

## 5 Numerische Resultate

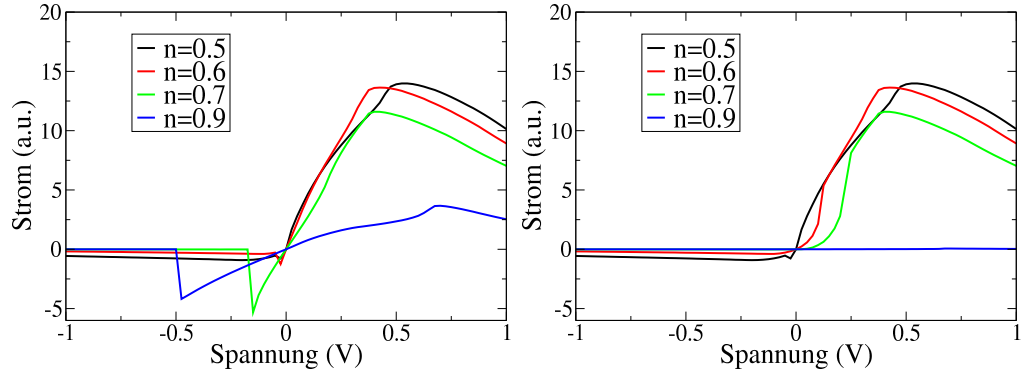


Abbildung 5.15: Tunnelstrom als Funktion der anliegenden Spannung für mehrere Besetzungszahlen  $n$  und parallele (links) bzw. antiparallele (rechts) Orientierung der beiden Magnetisierungen. Der Strom ist in willkürlichen Einheiten angegeben. Parameter aus Tab. 5.1.

liegende Spannungen stabil.

Die gesamte Abhängigkeit der kritischen Spannung von der Besetzungszahl ist im Phasendiagramm im rechten Bild von Abb. 5.14 zu sehen. Es wurde bereits begründet, dass bei Besetzungszahlen kleiner als etwa  $n = 0.52$ , bei denen keine selbstkonsistente Magnetisierung existiert, positive Spannungen immer zu paralleler und negative Spannungen immer zu antiparalleler Orientierung führen. Oberhalb von  $n = 0.52$  sind beide Orientierungen für  $V = 0$  stabil und es ergibt sich ein Hystereseverhalten, d.h. die parallele Orientierung wird unterhalb einer gewissen kritischen negativen Spannung antiparallel und die antiparallele Ausrichtung wird analog dazu bei einer kritischen positiven Spannung umorientiert. Der Betrag der kritischen Spannung nimmt mit steigender Besetzungszahl für beide Ausrichtungen zu. Ab etwa  $n \approx 0.85$  bleibt die antiparallele Orientierung stabil, d.h. egal wie groß die angelegte Spannung ist, wird sich die Richtung der Magnetisierung nicht umkehren, was auch im linken Bild zu sehen war. Die parallele Orientierung kann allerdings weiterhin geschaltet werden. Erst oberhalb von  $n \approx 0.95$  bleibt auch sie unabhängig von der angelegten Spannung stabil.

Die Zunahme der kritischen Spannung mit steigender Besetzungszahl ist eine Folge der ebenfalls zunehmenden Magnetisierung (vgl. Abb. 5.13). Wenn  $n$  nur knapp oberhalb von 0.5 liegt, ist die Magnetisierung noch relativ klein und somit auch instabiler; sie kann also leichter gedreht werden. Daher reicht bereits eine kleine Spannung aus. Für höhere Besetzungszahlen nimmt sie aber deutlich zu, wodurch auch der kritische Strom bzw. die kritische Spannung erhöht werden müssen. Die Stärke des Stroms hängt dabei von der Besetzungszahl ab. Tunneln kann nämlich aufgrund des Pauli-Prinzips nur dann stattfinden, wenn besetzte Zustände auf einer Seite des Isolators unbesetzten Zuständen auf der anderen Seite gegenüberliegen. Für mittlere Besetzungszahlen von  $n \approx 0.5$  würde man somit einen maximalen Tunnelstrom erwarten, da dieser Wert einen Kompromiss mit etwa gleich vielen besetzten wie unbesetzten Zuständen darstellt. Mit steigender Besetzungszahl nehmen zwar die besetzten Zustände auf einer Seite zu, gleichzeitig neh-

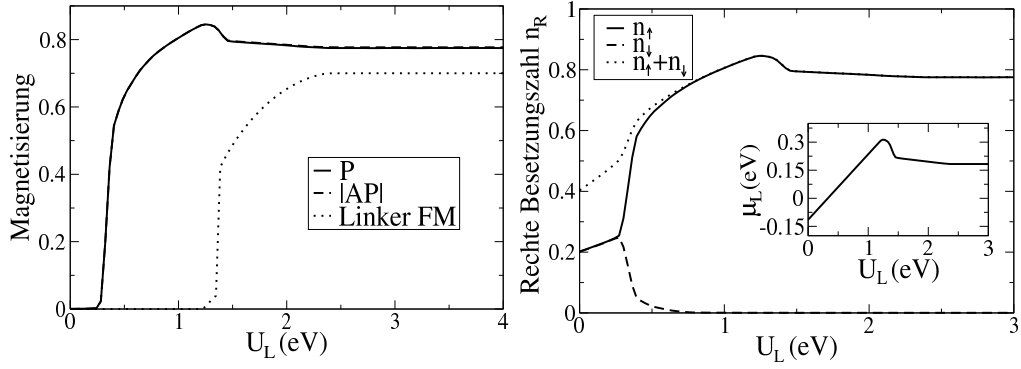


Abbildung 5.16: Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten in Abhängigkeit der linken Coulomb-Wechselwirkungsstärke  $U_L$  für beide Orientierungen ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung dargestellt. Außerdem ist die Magnetisierung des linken Ferromagneten eingezeichnet. Rechts: Besetzungszahl des rechten Ferromagneten für parallele Orientierung in Abhängigkeit der linken Coulomb-Wechselwirkungsstärke  $U_L$  ohne angelegte Spannung. Inset: Linkes chemisches Potential  $\mu_L$  als Funktion von  $U_L$ . Parameter aus Tab. 5.1.

men aber die unbesetzten auf der gegenüberliegenden Seite ab, wodurch die Stärke des Stroms reduziert wird. In Abb. 5.15 ist der Tunnelstrom für beide Orientierungen und verschiedene vorgegebene Besetzungszahlen gezeigt. Offenbar wird das gerade diskutierte Verhalten von der Theorie bestätigt. Während das Strommaximum für  $n = 0.5$  und  $n = 0.6$  noch ungefähr übereinstimmt, ist bei  $n = 0.7$  schon ein deutlicher Rückgang um rund 17 % in beiden Orientierungen zu beobachten. Bei  $n = 0.9$  ist die Stromstärke im parallelen Fall bereits auf ein Viertel ihres  $n = 0.5$ -Werts gesunken. In antiparalleler Orientierung ist sie sogar auf lediglich ein Tausendstel zurückgegangen, so dass sie im Vergleich zu den anderen Stromkurven gar nicht mehr zu sehen ist. Dieser Effekt ist daher neben der wachsenden Magnetisierung für das Ansteigen der kritischen Spannung verantwortlich. Oberhalb einer bestimmten Besetzungszahl, die in diesem Fall  $n \approx 0.95$  beträgt, wird das Schalten unmöglich, da der Strom selbst am Maximum zu gering wird. Auf analoge Weise lässt sich erklären, wieso die antiparallele Orientierung oberhalb von  $n \approx 0.85$  nicht mehr geschaltet werden kann, da der Strom in antiparalleler Orientierung für positive Spannungen offenbar deutlich schneller abfällt als im parallelen Fall. Dies liegt daran, dass das untere Spin Up-Band im antiparallelen Fall mit wachsender Besetzungszahl immer weniger spektrales Gewicht besitzt und außerdem zu höheren Energien rutscht (vgl. beispielsweise die SDA-QDOS in Abb. 5.4). Durch das geringere spektrale Gewicht stehen weniger Zustände zum Tunneln zur Verfügung, was Ursache für die deutliche Abnahme des Tunnelstroms ist.

### 5.6.2 Linke Coulomb-Wechselwirkungsstärke $U_L$

Im linken Bild von Abb. 5.16 ist die Abhängigkeit der Magnetisierung des rechten Ferromagneten von der linken Coulomb-Wechselwirkungsstärke  $U_L$  ohne anliegende Spannung gezeigt, die deutlich drastischer ausfällt als man naiv vielleicht vermuten würde. Insbesondere bricht die rechte Magnetisierung bei kleinem  $U_L$  komplett zusammen! Für die linke Magnetisierung ist dieses Verhalten natürlich zu erwarten und ist an der gepunkteten Kurve auch zu beobachten. Aber wieso die rechte Magnetisierung ebenfalls verschwindet ist keineswegs offensichtlich. Eine mögliche Erklärung wäre, dass der rechte Ferromagnet für kleine  $U_L$  in beiden Richtungen an Paramagnete gekoppelt ist, wodurch seine magnetische Stabilität verringert wird. Dies kann den beobachteten Effekt aber nicht erklären, da die rechte Magnetisierung dann nämlich gleichzeitig mit der linken, also bei  $U_L \approx 1.4$  eV, verschwinden müsste. Offenbar tut sie das aber nicht, sondern bleibt zunächst auch für noch kleinere  $U_L$  stabil bzw. nimmt sogar noch weiter zu. Das Zusammenbrechen der Magnetisierung muss also einen anderen Ursprung haben. Eine genauere Analyse zeigt, dass es nur indirekt mit der Verkleinerung der Wechselwirkungsstärke zu tun hat. Dazu ist im rechten Bild von Abb. 5.16 die Besetzungszahl  $n_R$  des rechten Ferromagneten in Abhängigkeit von  $U_L$  dargestellt. Im Inset der Abbildung ist zusätzlich noch das Verhalten des linken chemischen Potentials  $\mu_L$  gezeigt, das in diesem Fall mit  $\mu_P$  übereinstimmt. Man beobachtet für kleine  $U_L$  einen linearen Anstieg von  $\mu_L$ , auf den sich die Diskussion zunächst beschränken soll. Da der linke Ferromagnet in dem betrachteten Bereich noch keinen Magnetismus zeigt, gilt  $\langle n_{L,\uparrow} \rangle = \langle n_{L,\downarrow} \rangle = n/2$ . Beide Spinbänder werden daher um den gleichen Betrag  $U_L \langle n_{L,\sigma} \rangle = U_L n/2$  zu höheren Energien verschoben, wobei die Gesamtbesetzungszahl  $n$  für alle  $U_L$  konstant bleiben soll. Um dies zu gewährleisten, muss das chemische Potential ebenfalls linear mit  $U_L$  ansteigen. Da  $\mu_L$  indirekt aber auch die Besetzungszahl  $n_R$  des rechten Ferromagneten festlegt, bedeutet kleineres  $\mu_L$  automatisch auch geringeres  $n_R$ , da der rechte Bandschwerpunkt konstant gehalten wird. Tatsächlich nimmt die Gesamtbesetzungszahl  $n_R = \langle n_{R,\uparrow} \rangle + \langle n_{R,\downarrow} \rangle$  mit sinkendem  $U_L$  monoton ab (gepunktete Linie). Wenn  $n_R$  dann schließlich unter etwa 0.55 fällt, wurde bereits bei der Diskussion der Besetzungszahl festgestellt, dass die Magnetisierung zusammenbrechen muss (vgl. Abb. 5.13). Daher ist der beobachtete Übergang zum Paramagnetismus eher ein Teilchenzahleffekt und hängt nur indirekt mit der linken Wechselwirkungsstärke zusammen. Es handelt sich letztlich um eine Konsequenz der Nichtgleichgewichtsbeschreibung und dem Fehlen eines rechten chemischen Potentials  $\mu_R$ , wodurch die rechte Besetzungszahl, im Gegensatz zu denen der Kontakte, nicht fixiert ist. In Abschnitt 5.7 wird auf alternative Möglichkeiten der Behandlung des rechten Bandschwerpunkts eingegangen, mit denen unter anderem der Einfluss von  $U_L$  von dem Besetzungszahleffekt getrennt werden kann.

Auch das Verhalten der Magnetisierungskurve für größere  $U_L$  kann anhand des rechten Bilds von Abb. 5.16 verstanden werden. Bei  $U_L \approx 1.4$  eV wird die Magnetisierung des linken Ferromagneten stabil, wie an ihrem starken Anstieg zu erkennen ist. Die Besetzungszahl des Minoritätsbands nimmt also deutlich ab, wodurch das Majoritätsband aufgrund der geringeren Mean Field-Verschiebung zu tieferen Energien rutscht. Dies äußert sich in einem Abfallen des linken chemischen Potentials, das im Inset klar zu

## 5.6 Einfluss der Modellparameter auf das Magnetisierungsverhalten

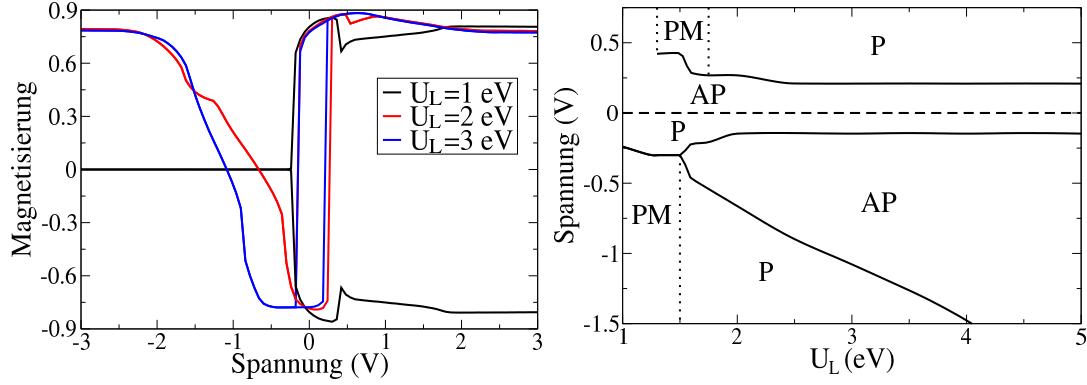


Abbildung 5.17: Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve des rechten Ferromagneten für verschiedene Coulomb-Abstoßungen  $U_L$  im linken Ferromagneten. Rechts: Abhängigkeit des Switchingpunkts von  $U_L$ . Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. PM bezeichnet die paramagnetische Phase. Parameter aus Tab. 5.1.

erkennen ist. Damit nimmt auch die rechte Besetzungszahl  $n_R$  ab. Da der rechte Ferromagnet sich bei diesen  $U_L$ -Werten in der Sättigung befindet, führt dies gleichzeitig zu dem beobachteten Rückgang der Magnetisierung. Dieser Rückgang ist daher vor allem dort deutlich, wo sich die linke Magnetisierung schnell ändert. Zwischen  $U_L = 1.5$  eV und  $U_L = 2.5$  eV nimmt sie vergleichsweise langsam zu und oberhalb von  $U_L = 2.5$  eV ist sie konstant. Daher ändert sich auch die rechte Magnetisierung in diesen Bereichen nur noch wenig bzw. gar nicht mehr.

Das komplizierteste Phasendiagramm der Tunnelstruktur erhält man durch Variation der linken Coulomb-Abstoßung  $U_L$  (rechtes Bild in Abb. 5.17). Ausgehend von antiparalleler Orientierung zeigt das System beim Anlegen einer positiven Spannung verschiedene Verhaltensweisen: für kleine  $U_L$  bleibt die antiparallele Ausrichtung unabhängig von der Spannung bestehen. Zwischen  $U_L \approx 1.3$  eV und  $U_L \approx 1.75$  eV wird der rechte Ferromagnet oberhalb einer kritischen Spannung paramagnetisch. Erst bei höheren Coulomb-Abstoßungen ergibt sich „normales“ Schalten von antiparalleler zu paralleler Ausrichtung. Die kritische Spannung nimmt zwischen  $U_L = 1.75$  eV und  $U_L = 2.4$  eV noch leicht ab, bleibt bei höherem  $U_L$  aber konstant. Dieser letzte Aspekt ist eine direkte Folge des Magnetisierungsverhaltens des linken Ferromagneten. Oberhalb von  $U_L = 2.4$  eV ist er nämlich in der Sättigung, d.h. eine Änderung von  $U_L$  hat keinen Einfluss mehr auf die Magnetisierung, wie in Abb. 5.16 zu erkennen war. Für  $U_L \lesssim 1.4$  eV fällt die linke Magnetisierung deutlich ab, während die rechte leicht zunimmt. Daher steigt auch die kritische Spannung in diesem Bereich an. Außerdem ist der Strom in diesem Bereich nicht mehr vollständig polarisiert, da der linke Ferromagnet nicht mehr gesättigt ist. Nimmt dessen Polarisation zu stark ab, reicht der Zufluss an Spin Up-Elektronen offenbar nicht mehr aus, um das System umzumagnetisieren. An den Magnetisierungskurven im linken Bild ist dies klar erkennbar, da die Magnetisierung bei  $V \approx 0.5$  deutlich geschwächt

wird. Wird diese Schwächung zu stark, nähert sich das System seinem paramagnetischen Zustand  $m_R = 0$  zu sehr an, um wieder in seinen Ausgangszustand zurückkehren zu können. Daher erfolgt zwischen  $U_L = 1.25$  eV und  $U_L = 1.75$  eV oberhalb einer kritischen Spannung ein Übergang des rechten Ferromagneten in die paramagnetische Phase.

Die parallele Orientierung ist bei zu großer negativer angelegter Spannung bei keinem  $U_L$  stabil. Solange der linke Ferromagnet noch keine ausgeprägte spontane Magnetisierung zeigt, d.h. für  $U_L < 1.5$  eV, wird der Ferromagnet durch Anlegen einer genügend großen negativen Spannung zum Paramagneten. Die Erklärung dieses Verhaltens ist wiederum, dass der rechte Ferromagnet in diesem Bereich an zwei Paramagnete koppelt, wodurch seine Magnetisierung natürlich deutlich herabsetzt wird, da nur unpolarisierte Elektronen tunneln werden. Dies verhindert letztlich sogar das Auftreten einer spontanen Magnetisierung, wie an der  $U_L = 1$  eV-Kurve im linken Bild zu erkennen ist. Für höhere  $U_L$  schaltet der rechte Ferromagnet zunächst in antiparallele Orientierung, um sich dann aber für noch höhere Spannungen erneut parallel auszurichten, wobei dieser zweite Schaltspunkt etwa linear mit  $U_L$  sinkt. Bei dem ersten Übergang parallel zu antiparallel handelt es sich um das bereits diskutierte Schaltverhalten. Der zweite Übergang ist bisher noch nicht aufgetreten, hat aber ganz ähnliche Ursachen. Da der linke Ferromagnet in Mean Field-Näherung modelliert wird, wird sein Spin Down-Band mit  $U_L \langle n_{L,\downarrow} \rangle$  ( $= 0.7U_L$  für  $U_L > 2.4$  eV), also linear in  $U_L$ , verschoben. Daher liegt ein Zusammenhang mit dem erneuten Schalten nahe. Dieses tritt nämlich genau dann auf, wenn das untere, teilweise besetzte Hubbard-Band des rechten Ferromagneten in die energetische Region des linken, unbesetzten Spin Down-Bands rutscht. Dadurch wird das Tunneln von Spin Down-Elektronen (und nur diesen!) ermöglicht. Damit kehrt sich das Magnetisierungsverhalten im Vergleich zu einem reinen Spin Up-Tunnelstrom genau um. Daher schaltet die antiparallele Orientierung in diesem Fall bei negativen Spannungen. Dieser Effekt tritt auch bei allen bisher gezeigten Magnetisierungskurven auf. Da  $U_L$  aber sehr groß gewählt wurde, liegt der zweite Schaltspunkt bei entsprechend hohen Spannungen und war daher nicht zu sehen.

Eine weitere Auffälligkeit des Phasendiagramms besteht darin, dass für kleine  $U_L$  die antiparallele Orientierung stabil bleibt, die parallele jedoch nicht. Dies ist unerwartet, da der linke Ferromagnet in diesem Bereich keine endliche Magnetisierung aufweist und die Unterscheidung zwischen parallel und antiparallel daher eigentlich nicht sinnvoll ist. Tatsächlich erkennt man anhand der  $U_L = 1$  eV-Kurve im linken Bild von Abb. 5.17, dass die Magnetisierungskurven tatsächlich für beide Orientierungen vollkommen symmetrisch sind. Der scheinbare Unterschied zwischen beiden hat also nur mit dem Vorzeichen der Spannung und nicht etwa mit der Richtung der Magnetisierung zu tun. Für negative Spannungen gehen beide Orientierungen in die paramagnetische Lösung über, während es bei positiven Spannungen zwar einen deutlichen Rückgang bei etwa  $V = 0.5$  gibt. Dieser reicht jedoch noch nicht aus, um das System komplett zu entmagnetisieren.

### 5.6.3 Rechte Coulomb-Wechselwirkungsstärke $U_R$

In Abb. 5.18 ist die rechte Magnetisierung in Abhängigkeit der Coulomb-Wechselwirkungsstärke  $U_R$  des rechten Ferromagneten dargestellt. Man erkennt, dass eine kritische

## 5.6 Einfluss der Modellparameter auf das Magnetisierungsverhalten

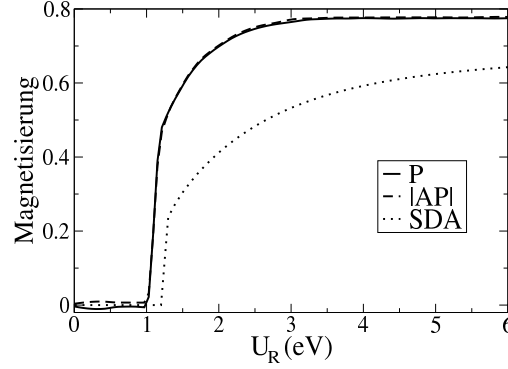


Abbildung 5.18: Magnetisierung des rechten Ferromagneten für beide Orientierungen als Funktion der rechten Wechselwirkungsstärke  $U_R$  ohne anliegende Spannungsstärke. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung dargestellt. Die gepunktete Linie ist die entsprechende Gleichgewichtsmagnetisierung der SDA. Parameter aus Tab. 5.1.

Wechselwirkungsstärke  $U_{R,c}$  notwendig ist, um eine endliche Magnetisierung zu erhalten. Diese ist für beide Orientierungen gleich und beträgt für die gewählten Parameter  $U_{R,c} \approx 1$  eV. Dies entspricht einer effektiven Wechselwirkungsstärke von  $U_{R,c}/W_R = 0.5$ . Oberhalb der kritischen Wechselwirkung steigen beide Magnetisierungen stark an, gehen dann aber für weiter steigendes  $U_R$  in die Sättigung über. Verglichen mit der SDA (gepunktete Linie) hat die NSDA eine geringere kritische Wechselwirkungsstärke und der Übergang in die Sättigung erfolgt deutlich schneller. Auch der Sättigungswert der Magnetisierung ist mit der NSDA größer. Die Ursache hierfür wurde bereits in Abschnitt 5.6.1 diskutiert: im Gleichgewicht wird die Sättigungsmagnetisierung mit der vorgegebenen Besetzungszahl, hier also  $n = 0.7$ , übereinstimmen. Im Nichtgleichgewicht ist dies jedoch nicht der Fall, wie anhand von Abb. 5.13 gezeigt werden konnte. Bei  $n = 0.7$  ergibt sich eine Nichtgleichgewichtsbesetzungszahl von  $n_R \approx 0.77$ , die gerade mit dem Sättigungswert der rechten Magnetisierung übereinstimmt. Dabei spielt die relative Orientierung der beiden Magnetisierungen keine Rolle. In der Abbildung ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung dargestellt (gestrichelte Linie), die über den gesamten  $U_R$ -Bereich praktisch identisch mit der parallelen Magnetisierung (durchgezogene Linie) ist. Insgesamt lässt sich also festhalten, dass beide Orientierungen sich zumindest qualitativ sehr ähnlich wie die SDA verhalten. Die erhöhte magnetische Stabilität ist erneut auf die Kopplung mit dem vollständig polarisierten linken Ferromagneten zurückzuführen. Dadurch wird die Entstehung einer Asymmetrie der beiden Spinrichtungen im rechten Ferromagnet offenbar erleichtert.

Die Abhängigkeit des Schaltverhaltens von der rechten Coulomb-Wechselwirkungsstärke, die in Abb. 5.19 gezeigt ist, ist deutlich einfacher als die von  $U_L$  im letzten Abschnitt. Der rechte Ferromagnet zeigt erst ab etwa  $U_R = 1$  eV von sich aus eine spontane Magnetisierung, solange keine Spannung anliegt (vgl. Abb. 5.18). Unterhalb dieses Wertes kann daher auch kein Schalten auftreten, es zeigt sich lediglich dasselbe Phänomen wie

## 5 Numerische Resultate

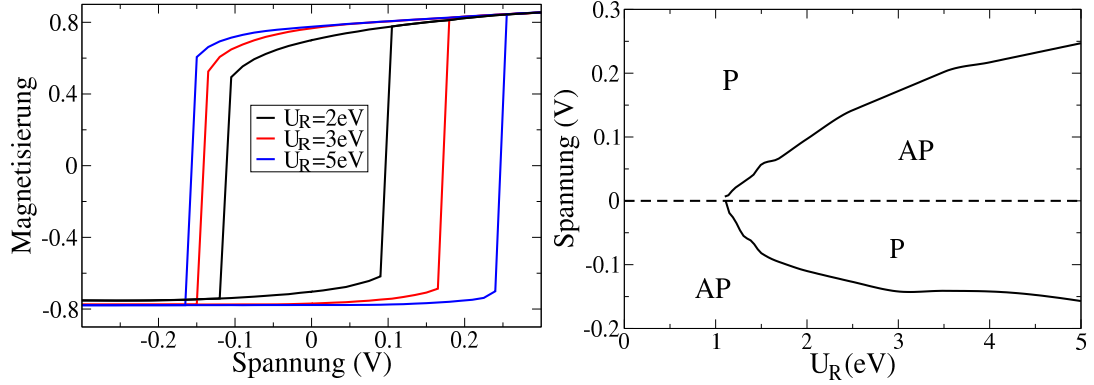


Abbildung 5.19: Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurven des rechten Ferromagneten für verschiedene Coulomb-Wechselwirkungsstärken  $U_R$ . Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von  $U_R$ . Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1.

z.B. bei geringer Besetzungszahl. Wie dort bereits diskutiert wurde, führt eine positive Spannung zum Zufluss von Spin Up-Elektronen und damit zu paralleler Ausrichtung, während negative Spannungen einen Abfluss von Spin Up-Elektronen, also antiparallele Orientierung, zur Folge haben. Dies ist anhand des Phasendiagramms klar zu erkennen. Oberhalb von  $U_R = 1 \text{ eV}$  zeigt der rechte Ferromagnet in beiden Orientierungen spontane Magnetisierung. Für alle  $U_R$ , die über diesem Wert liegen, gibt es einen Übergang von antiparalleler zu paralleler Orientierung bei positiven Spannungen bzw. von paralleler zu antiparalleler Orientierung bei negativen Spannungen. Es kommt also zum strominduzierten Schalten. Dabei ist festzustellen, dass die kritische Spannung, die dazu benötigt wird, mit wachsender Wechselwirkungsstärke ebenfalls ansteigt, wobei dieser Anstieg bei positiven Spannungen deutlicher als bei negativen ausfällt. Da die Magnetisierung des rechten Ferromagneten mit steigendem  $U_R$  zunimmt, wird ihre Umorientierung entsprechend schwieriger und erfordert höhere Spannungen. Für größere  $U_R > 3 \text{ eV}$  geht die rechte Magnetisierung in die Sättigung über, d.h. sie ändert sich nicht mehr sehr stark (vgl. Abb. 5.18). Daher nimmt auch die Änderung des Schaltpunktes mit größer werdendem  $U_R$  ab, was vor allem bei negativen Spannungen deutlich erkennbar ist. Als Fazit kann also geschlossen werden, dass kleine  $U_R$  günstiger zum Schalten sind. Andererseits muss natürlich auch berücksichtigt werden, dass dann die Sättigungsmagnetisierungen geringer sind und daher die experimentelle Messung der Magnetisierung schwieriger wird. Für eine eventuelle technische Anwendung muss also zwischen beiden Effekten sorgfältig abgewogen werden.



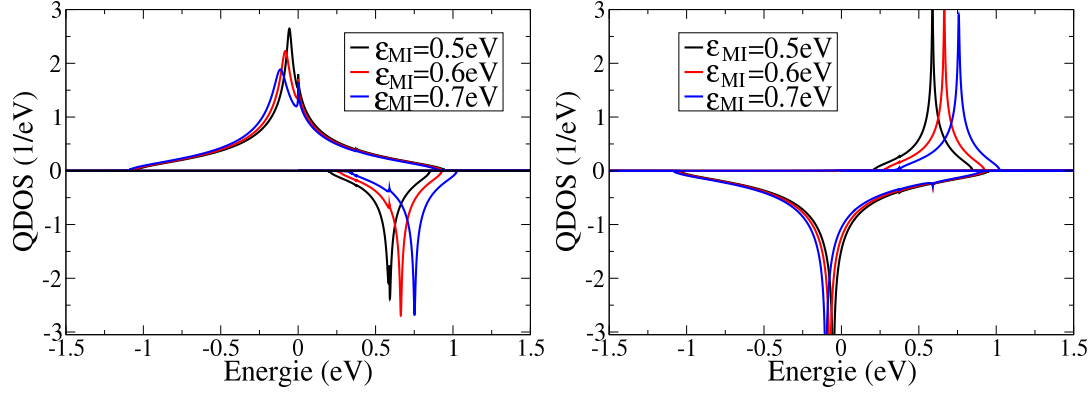


Abbildung 5.20: Quasiteilchenzustandsdichten des rechten Ferromagneten für verschiedene Hybridisierungsstärken  $\epsilon_{MI}$ . Es sind nur die unteren Hubbard-Bänder dargestellt. Im linken Bild sind die Magnetisierungen parallel, im rechten antiparallel orientiert. Parameter aus Tab. 5.1.

#### 5.6.4 Hybridisierungsstärke $\epsilon_{MI}$ zwischen dem Isolator und den Ferromagneten

Die Kopplung zwischen den beiden Ferromagneten und dem Isolator wurde symmetrisch gewählt, so dass  $\epsilon_{LI} = \epsilon_{RI} \equiv \epsilon_{MI}$  gilt. Die Hybridisierung  $\epsilon_{RP}$  zwischen dem rechten Ferromagneten und dem Paramagneten, die im nächsten Abschnitt diskutiert werden soll, wird sich hingegen üblicherweise von  $\epsilon_{MI}$  unterscheiden. Bei der Diskussion der Hybridisierungsstärken muss beachtet werden, dass man sie nicht beliebig groß wählen darf, um im physikalisch glaubwürdigen Bereich zu bleiben. Um eine ungefähre Vorstellung ihrer maximalen Größenordnung zu bekommen, bietet es sich an, den Hoppingparameter  $t_R$  im rechten Ferromagneten mit der Stärke der Hybridisierung zu vergleichen. Die Greenfunktionen hängen insbesondere von der Dispersion  $\epsilon_{\mathbf{k}R}$ , die durch  $t_R$  festgelegt wird, und der Tunnelselbstenergie, die proportional zu  $\epsilon_{MI}^4$  ist, ab. Als grobe Abschätzung lässt sich daher  $\epsilon_{MI}^4 \lesssim |t_R|$  verwenden. Wäre diese Ungleichung verletzt, würde das dazu führen, dass die Elektronen wahrscheinlicher Tunneln als innerhalb des Magneten den Gitterplatz zu wechseln. Dies wäre physikalisch sehr unglaublich. Für bcc-Gitter gilt  $|t_R| = W_R/16$ , wobei 16 die Zahl der nächsten Nachbarn eines beliebigen Gitterplatzes ist. Für die gewählte Bandbreite von  $W_R = 2$  eV ergibt sich aus der Ungleichung folgende Abschätzung:  $\epsilon_{MI} \lesssim 0.6$  eV.

In Abb. 5.20 sind die unteren Hubbard-Bänder des rechten Ferromagneten für verschiedene  $\epsilon_{MI}$ -Werte gezeigt. Interessant ist dabei vor allem das Verhalten des Minoritätsbands, also Spin Down im linken bzw. Spin Up im rechten Bild. Für  $\epsilon_{MI} = 0.5$  und  $0.6$  eV liegt es vollständig im Bereich des Majoritätsbands. Bei Hybridisierungen, die die Abschätzung  $\epsilon_{MI}^4 < |t_R|$  verletzen, also beispielsweise  $\epsilon_{MI} = 0.7$  eV in der Abbildung, ragt es dagegen nach oben über das Majoritätsband hinaus. Im parallelen Fall liegt dies daran, dass der Schwerpunkt des Spin Up-Bands aufgrund der Hybridisierung zu tieferen Energien rutscht, wodurch  $\langle n_{R,\uparrow} \rangle$  und damit auch die Verschiebung des Spin Down-Bands

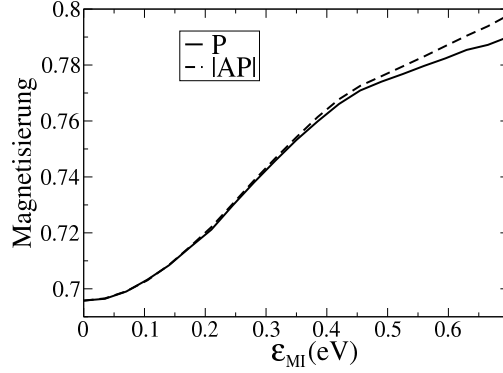


Abbildung 5.21: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Hybridisierungsstärke  $\epsilon_{MI}$  zwischen dem Isolator und den beiden Ferromagneten ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung dargestellt. Parameter aus Tab. 5.1.

erhöht werden. In antiparalleler Orientierung wird das Spin Up-Band direkt durch die Abstoßung aufgrund der Hybridisierung verschoben. In den folgenden Abschnitten werden nur solche Hybridisierungsstärken verwendet, die die obige Abschätzung erfüllen, wodurch die Minoritätsbänder immer vollständig im Bereich endlicher Majoritätszustandsdichte liegen werden.

In Abb. 5.21 ist die Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion von  $\epsilon_{MI}$  gezeigt. Für verschwindende Kopplung  $\epsilon_{MI} = 0$  eV stimmt sie für beide Orientierungen überein. Da der rechte Ferromagnet in diesem Fall nur an den Paramagneten koppelt, ist dieses Ergebnis zu erwarten, da es keine Vorzugsrichtung für den Spin gibt und die Unterscheidung zwischen paralleler bzw. antiparalleler Ausrichtung daher bedeutungslos wird. Die Magnetisierungen unterscheiden sich lediglich durch ihr Vorzeichen. Mit steigender Hybridisierungsstärke nimmt die Magnetisierung in beiden Orientierungen monoton zu. Für kleine Hybridisierungen verlaufen beide Kurven identisch. Ab  $\epsilon_{MI} \approx 0.3$  eV ist eine leichte Aufspaltung erkennbar, die ab  $\epsilon_{MI} \approx 0.45$  eV deutlicher wird. Oberhalb dieses Werts steigen beide Magnetisierungen linear an, wobei die Steigung der antiparallelen Orientierung größer ist. Der Grund für den Anstieg ist der Abstoßungseffekt zwischen linkem und rechtem Spin Up-Band. Dieser wird umso stärker, je stärker die Hybridisierung ist, was in Abschnitt 5.1 gezeigt wurde. In antiparalleler Orientierung liegt das rechte Spin Up-Band oberhalb des linken, wird also mit steigender Hybridisierung noch weiter nach oben geschoben (vgl. die QDOS in Abb. 5.20). Da Spin Up in diesem Fall Minoritätsrichtung ist, wird die Magnetisierung also betragsmäßig ansteigen. Für parallele Orientierung liegen die Spin Up-Bänder der beiden Ferromagnete auf gleicher Höhe. Daher gibt es keine bedeutende Verschiebung des gesamten Bands, sondern lediglich eine Verlagerung von spektralem Gewicht weg vom gemeinsamen Bandschwerpunkt. Daher steigt die Magnetisierung zwar auch in diesem Fall mit stärkerer Hybridisierung an, allerdings nicht ganz so stark wie bei antiparalleler Orientierung. Die Differenz zwischen beiden Orientierungen ist allerdings, relativ gesehen, nicht besonders groß.

## 5.6 Einfluss der Modellparameter auf das Magnetisierungsverhalten

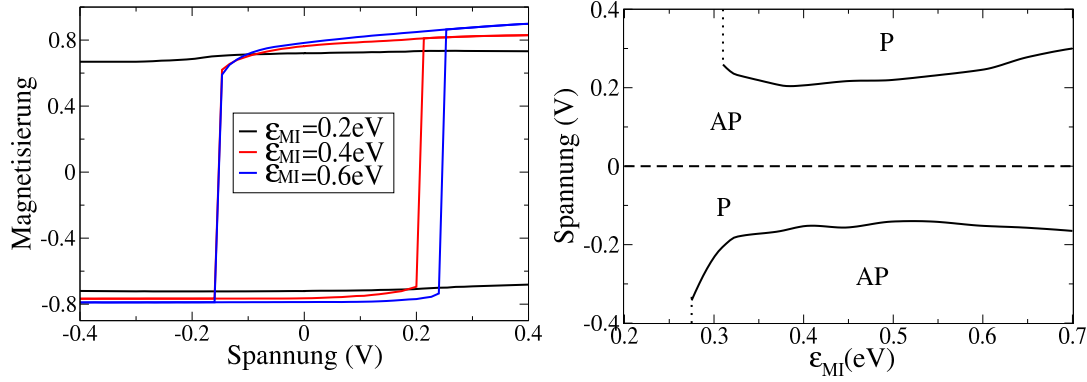


Abbildung 5.22: Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurven des rechten Ferromagneten für verschiedene Hybridisierungsstärken  $\epsilon_{MI}$ . Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von der Hybridisierung. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1.

Verglichen mit den bereits diskutierten Parametern ist das Phasendiagramm in Abhängigkeit der Hybridisierungsstärke  $\epsilon_{MI}$  in Abb. 5.22 verhältnismäßig einfach. Ist die Kopplung zu gering, bleiben die jeweiligen  $V = 0$ -Phasen stabil, d.h. für positive Spannungen, wo von antiparalleler Orientierung ausgegangen wird, bleibt diese bestehen, während bei negativen Spannungen die parallele Orientierung durchgehend stabil ist. Anhand der schwarzen Magnetisierungskurve für  $\epsilon_{MI} = 0.2\text{ eV}$  im linken Bild von Abb. 5.22 ist aber erkennbar, dass die Spannung durchaus einen, wenn auch nicht sehr großen, Einfluss auf die Magnetisierung hat. Und zwar nimmt die parallele Magnetisierung mit negativer Spannung ab, während die antiparallele Magnetisierung mit positiver Spannung leicht ansteigt. Dies ist dasselbe Verhalten, dass beim Schalten beobachtet wird, nur dass die Abnahme in diesem Fall offenbar nicht stark genug ist, um das System zu destabilisieren. Erst oberhalb einer kritischen Hybridisierungsstärke kann die Orientierung durch Anlegen einer Spannung umgedreht werden. Dieses Verhalten war aufgrund der Erklärung des Schaltens in Abschnitt 5.4 und des Tunnelstroms in Abschnitt 5.5 zu erwarten. Dort wurde festgestellt, dass das Schalten zwei Ursachen hat, nämlich zum einen den Abstoßungseffekt aufgrund der Hybridisierung und zum anderen den Stromfluss zwischen den Schichten. Beide Effekte hängen stark von der Größe der Hybridisierung ab, daher ist für zu geringe Hybridisierungen auch kein Schalten möglich. Die kritische Hybridisierungsstärke, oberhalb derer Schalten möglich wird, ist für parallele Orientierung etwas geringer als für antiparallele ( $\epsilon_{MI} \approx 0.27\text{ eV}$  verglichen mit  $\epsilon_{MI} \approx 0.31\text{ eV}$ ). Ursache hierfür ist, dass der Strom in paralleler Orientierung stärker ist, da in diesem Fall auf beiden Seiten des Isolators viele Spin Up-Zustände vorhanden sind. Bei antiparalleler Ausrichtung ist das spektrale Gewicht des unteren rechten Spin Up-Bands dagegen deutlich geringer. Nachdem das Schalten oberhalb der kritischen Hybridisierungsstärke möglich ist, wird der Betrag der kritischen Spannung durch weiteres Erhöhen von  $\epsilon_{MI}$  zunächst geringer. Die Umorientierung der Magnetisierung wird somit leichter. Für zu große Hybridisierung

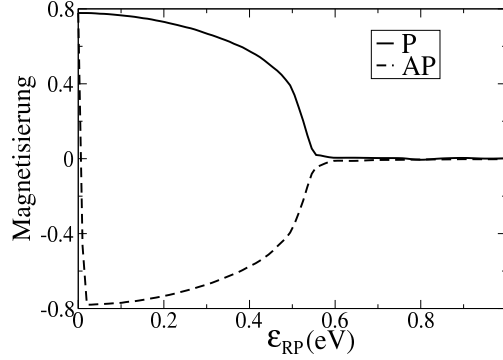


Abbildung 5.23: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Hybridisierungsstärke  $\epsilon_{RP}$  zwischen rechtem Ferromagnet und Paramagnet ohne anliegende Spannung. Parameter aus Tab. 5.1.

gen  $\epsilon_{MI} > 0.5$  eV dreht sich das Verhalten aber wieder um, d.h. der Schaltpunkt wandert wieder zu betragsmäßig höheren Spannungen. Dies geschieht aufgrund der Zunahme der Magnetisierung (vgl. Abb. 5.21). Die antiparallele Magnetisierung steigt in Abhängigkeit der Hybridisierungsstärke etwas schneller, daher nimmt auch die entsprechende kritische Spannung im Vergleich zur parallelen Orientierung schneller zu. Insgesamt ist also das relativ breite Plateau zwischen  $\epsilon_{MI} = 0.4$  eV und  $\epsilon_{MI} = 0.6$  eV der optimale Bereich zum Schalten.

In dem bereits erwähnten Experiment von Huai *et al.* [124] verwendeten die Autoren, neben der in Abb. 5.9 gezeigten Tunnelstruktur, auch noch eine weitere mit höheren Widerstandswerten ( $R_{AP} \approx 129 \Omega$  und  $R_P \approx 123 \Omega$  verglichen mit  $R_{AP} \approx 75 \Omega$  und  $R_P \approx 72 \Omega$  für die erste Struktur). Die kritischen Ströme sind dadurch gestiegen, d.h. Schalten wurde schwieriger. Der Übergang von parallel zu antiparallel erfolgte bei 1.7 mA (vorher: 1.37 mA). Der umgekehrte Übergang von antiparallel zu parallel erfolgt hingegen bei 2.0 mA (vorher: 1.87 mA). Eine Erhöhung des Widerstands entspricht im Modell einer Verringerung der Hybridisierungsstärke  $\epsilon_{MI}$  bzw. einer Erhöhung des Isolatorbandschwerpunkts (vgl. Abschnitt 5.6.6). Daher stimmen die Aussagen des theoretischen Modells qualitativ mit den experimentellen Resultaten überein. Auch in der Theorie steigt die kritische Spannung mit sinkender Hybridisierungsstärke und sie ist beim Übergang antiparallel zu parallel durchgehend höher als für die umgekehrte Richtung, wie in Abb. 5.22 zu sehen ist.

### 5.6.5 Hybridisierungsstärke $\epsilon_{RP}$ zwischen Paramagnet und rechtem Ferromagnet

Die Magnetisierungen zeigen in Abhängigkeit der Hybridisierung zwischen rechtem Ferromagnet und Paramagnet sowohl in paralleler als auch antiparalleler Orientierung ein fast symmetrisches Verhalten (vgl. Abb. 5.23). Da der Paramagnet keine Spinvorzugsrichtung hat, ist eine solche Symmetrie zu erwarten. Beide Magnetisierungen fallen mit steigender Hybridisierung betragsmäßig monoton ab, bis sie bei  $\epsilon_{RP} \approx 0.55$  eV schließ-

## 5.6 Einfluss der Modellparameter auf das Magnetisierungsverhalten

lich komplett verschwinden. Eine weitere Auffälligkeit besteht darin, dass im Grenzfall  $\epsilon_{RP} \rightarrow 0$  eV die antiparallele Ausrichtung nicht stabil ist und daher immer positive Magnetisierung vorliegt. Die Abnahme und das anschließende Zusammenbrechen der Magnetisierung mit steigendem  $\epsilon_{RP}$  ist nicht sehr überraschend, da die Kopplung eines Ferromagneten an einen Paramagneten natürlich die Magnetisierung schwächen muss. Wird diese Abschwächung zu groß, kann kein selbstkonsistenter, spontaner Magnetismus mehr existieren und die Magnetisierung sinkt entsprechend auf Null. Das plötzliche Abbrechen der antiparallelen Magnetisierung bei  $\epsilon_{RP} \rightarrow 0$  eV ist hingegen unerwartet. Die Kopplung an einen nicht spinabhängigen Paramagneten sollte eigentlich nicht in der Lage sein, die Symmetrie zwischen paralleler und antiparalleler Orientierung so deutlich zu brechen. Und in der Tat handelt es sich bei diesem Effekt nicht um Physik, sondern um ein Artefakt des Modells bzw. der verwendeten Näherungen. Die Besetzungszahl wird aus der kleineren Greenfunktion berechnet, die wiederum proportional zur kleineren Tunnelselbstenergie ist:

$$\langle n_{R,\sigma} \rangle \sim \int dE \sum_{\mathbf{k}_R} G_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) = \int dE \sum_{\mathbf{k}_R} G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) \Delta_{R\sigma}^<(E) G_{\mathbf{k}_R\sigma}^a(E), \quad (5.8)$$

Aufgrund der Annahme der Wellenzahlunabhängigkeit der Tunnelkopplungen ist die Tunnelselbstenergie ebenfalls nicht von der Wellenzahl abhängig, d.h.  $\Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) \equiv \Delta_{R\sigma}^<(E)$ . Etwas vereinfacht geschrieben lautet sie (vgl. die Gleichungen (3.55), (3.57) und (3.58)):

$$\Delta_{R\sigma}^<(E) \propto \alpha(E) \epsilon_{MI}^4 f_L(E) \rho_{L,\sigma}(E) + \epsilon_{RP}^2 f_P(E) \rho_{P,\sigma}(E) \quad (5.9)$$

Dabei ist  $\alpha(E) = \sum_{\mathbf{k}_I} |G_{\mathbf{k}_I\sigma}^r(E)|^2$ ,  $f_M(E)$  die Fermifunktion und  $\rho_{M,\sigma}(E)$  die spinabhängige Zustandsdichte in Region  $M$ . Im Grenzfall  $\epsilon_{RP} = 0$  eV verschwindet der zweite Term offenbar und die Teilchenzahl wird nur noch durch die linke Tunnelselbstenergie bestimmt. Der linke Ferromagnet ist aber, da er in Mean Field-Näherung mit großem  $U_L$  modelliert wird, so stark aufgespalten, dass keine Spin Down-Zustände besetzt sind, d.h. für alle  $E$  gilt  $f_L(E) \rho_{L,\downarrow}(E) \equiv 0$ . Dadurch wird die kleinere Spin Down-Tunnelselbstenergie  $\Delta_{R\downarrow}^<(E)$  Null und damit letztlich auch  $\langle n_{R,\downarrow} \rangle$ . Die antiparallele Orientierung kann also tatsächlich bei  $\epsilon_{RP} = 0$  eV nicht stabil sein, da  $m_R = \langle n_{R,\uparrow} \rangle - \langle n_{R,\downarrow} \rangle = \langle n_{R,\uparrow} \rangle$  immer positiv ist.

Der Grenzfall  $\epsilon_{RP} = 0$  eV ist aus Sicht des Modells natürlich ein wenig exotisch, da der Paramagnet als rechtes Elektronenreservoir gebraucht wird und verschwindende Kopplung daher nicht der physikalischen Situation in einem Tunnelsystem entspricht. Im Rahmen einer Modellstudie kann er aber natürlich trotzdem diskutiert werden. Möchte man die antiparallele Ausrichtung auch für diesen Fall stabilisieren, so sind drei Möglichkeiten denkbar, wie dies erreicht werden könnte. Die offensichtlichste Lösung wäre es, einfach die Wechselwirkungsstärke im linken Ferromagneten soweit zu reduzieren, dass auch Spin Down-Zustände besetzt sind. Dies würde allerdings nur in einem kleinen Parameterbereich funktionieren, in dem der linke Ferromagnet schon magnetisiert ist, aber noch keine vollständige Polarisierung zeigt. Die zweite Möglichkeit wäre es, auch für den

## 5 Numerische Resultate

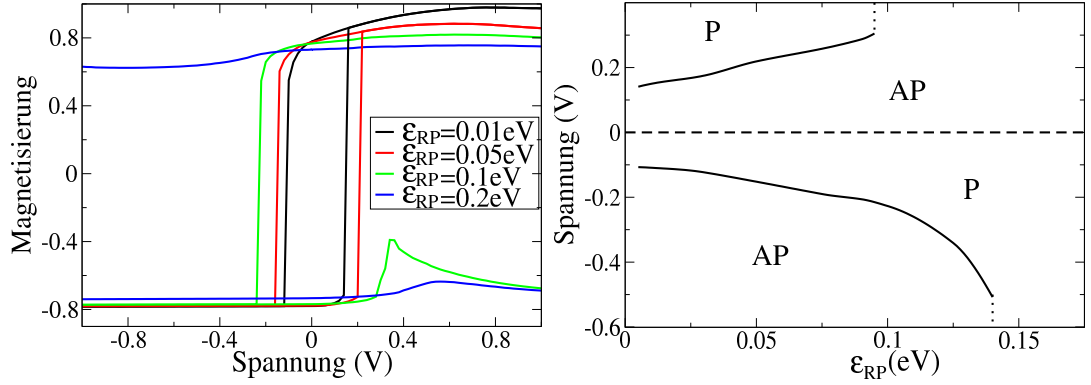


Abbildung 5.24: Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurven des rechten Ferromagneten für verschiedene Hybridisierungsstärken  $\epsilon_{RP}$  zwischen rechtem Ferromagnet und Paramagnet. Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von  $\epsilon_{RP}$ . Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1.

linken Ferromagneten eine Näherung, die über Mean Field hinausgeht, wie z.B. die SDA, zu verwenden. Dann wäre es deutlich einfacher eine endliche, aber noch nicht gesättigte Magnetisierung zu erreichen. Darauf wird in Abschnitt 5.9 näher eingegangen. Die dritte und letzte Möglichkeit eine negative Magnetisierung auch bei  $\epsilon_{RP} = 0$  eV zu erhalten, wäre die Verwendung einer Näherung, deren kleinere Wechselwirkungsselbstenergie nicht mehr verschwindet. Diese taucht dann explizit in der Keldysh-Gleichung auf:

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) = G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) \left( \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) + \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) \right) G_{\mathbf{k}_R\sigma}^a(E) \quad (5.10)$$

Die Spin Down-Besetzungszahl kann also selbst für verschwindende Tunnelselbstenergie endlich bleiben, sofern  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\downarrow}^<(E)$  nicht, wie im Fall von Mean Field und NSDA, überall Null ist. Diese Methode wäre sicherlich die glaubwürdigste, da dann endliche Besetzungszahlen auch unabhängig von den Parametern der beiden Kontakte vorliegen würden. Allerdings ist klar, dass die Entwicklung einer über die NSDA hinausgehenden Näherung für die Wechselwirkungsselbstenergie im Nichtgleichgewicht auch gleichzeitig mit dem meisten Aufwand verbunden wäre.

Es existieren also mehrere Methoden, um das Zusammenbrechen der antiparallelen Magnetisierung zu verhindern. Da aber nur für endliche  $\epsilon_{RP}$  ein Strom durch das System fließen kann, wird für die weitere Diskussion der Grenzfall  $\epsilon_{RP} = 0$  eV nicht mehr von Interesse sein. Daher ist es durchaus legitim, das Modell in der vorliegenden Form weiter zu verwenden.

Das Phasendiagramm in Abhängigkeit der Hybridisierung  $\epsilon_{RP}$ , das in Abb. 5.24 gezeigt ist, ist im Wesentlichen gerade die Spiegelung des  $\epsilon_{MI}$ -Phasendiagramms. Für kleine  $\epsilon_{RP}$  ist Schalten möglich, für größere  $\epsilon_{RP}$  jedoch nicht mehr. Auch hier bricht das Schalten zuerst für positive Spannungen bei etwa  $\epsilon_{RP} = 0.09$  eV ab und erst später auch für

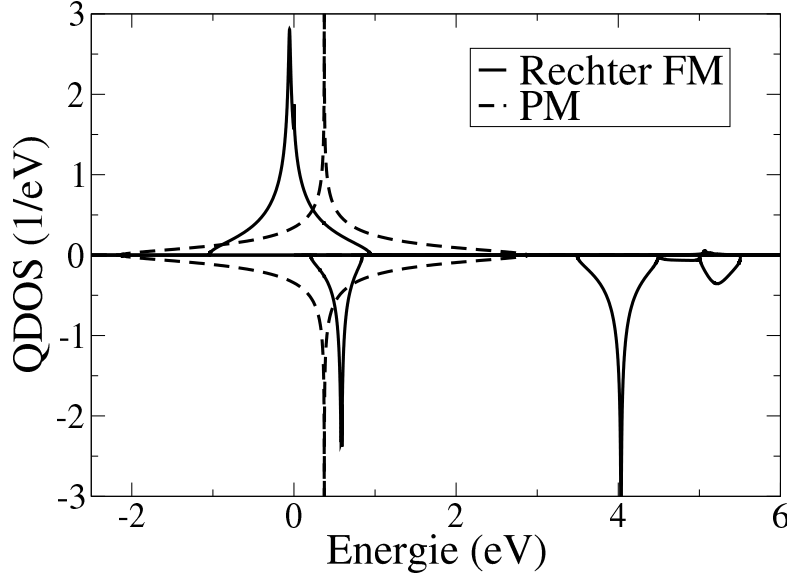


Abbildung 5.25: Quasiteilchenzustandsdichte des rechten Ferromagneten und des Paramagneten mit  $\epsilon_{RP} = 0.01$  eV und paralleler Ausrichtung der beiden Magnetisierungen. Alle anderen Parameter stimmen mit denen aus Tab. 5.1 überein.

negative Spannungen bei  $\epsilon_{RP} = 0.14$  eV. Die  $V = 0$ -Magnetisierung hat sich bei diesen Werten nur geringfügig von ihrem Sättigungswert bei  $\epsilon_{RP} = 0$  eV entfernt (vgl. Abb. 5.23). Das Schalten bricht somit deutlich vor der Magnetisierung ab. Dieser Effekt ist unerwartet, da die kritische Spannung bei den bisher diskutierten Parametern immer eng mit der Magnetisierung korreliert war, so dass eine geringere Magnetisierung auch einem geringeren Schaltspunkt entsprach. Offenbar wird das Schalten in diesem Fall aber schwieriger (die kritische Spannung wird größer), je größer  $\epsilon_{RP}$  ist, während sich die Magnetisierung genau umgekehrt verhält.

In Abb. 5.25 ist die Quasiteilchenzustandsdichte des rechten Ferromagneten zusammen mit der Zustandsdichte des Paramagneten für eine Hybridisierung von  $\epsilon_{RP} = 0.01$  eV eingezeichnet. Der paramagnetische Bandschwerpunkt liegt energetisch genau zwischen den unteren Spin Up- und Spin Down-Bändern des rechten Ferromagneten. Beim Schalten tauschen die beiden Spinbänder ihre Positionen. Um dies zu erreichen, müssen sie also durch die Region der paramagnetischen Bänder hindurchrutschen. Allerdings wirkt auch hier die Hybridisierung zwischen den Bändern abstoßend, d.h. sie werden dies nicht „freiwillig“ tun. Sie werden vielmehr durch die (indirekte) Hybridisierung  $\epsilon_{MI}$  mit dem linken Ferromagneten dazu gezwungen. Mit steigendem  $\epsilon_{RP}$  macht sich die Abstoßung aber immer stärker bemerkbar, während der Einfluss der linken Hybridisierung in diesem Fall konstant bleibt. Oberhalb eines gewissen kritischen  $\epsilon_{RP}$  gelingt es also den rechten Spinbändern nicht mehr, die paramagnetischen Bänder zu überqueren, da die Abstoßung zu stark wird. Damit können sie auch ihre Positionen nicht mehr tauschen und

## 5 Numerische Resultate

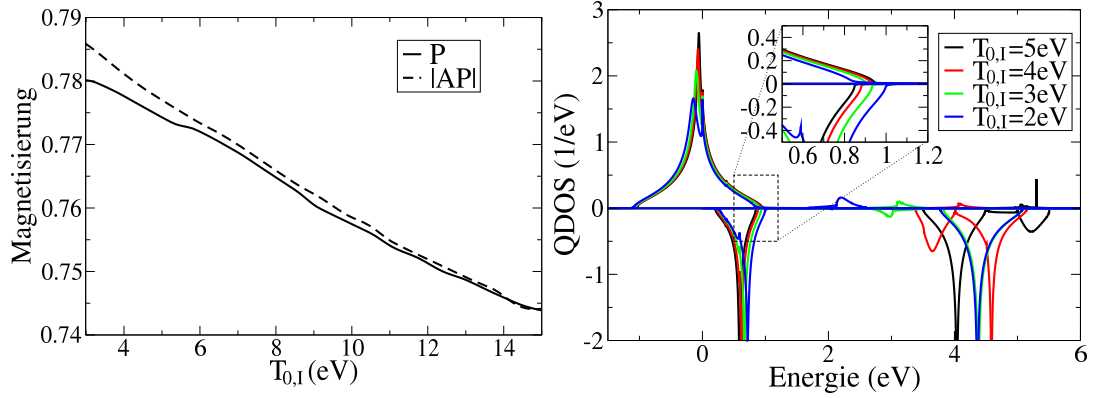


Abbildung 5.26: Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion des Isolatorbandschwerpunkts  $T_{0,I}$  für parallele und antiparallele Orientierung ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung dargestellt. Rechts: Quasiteilchenzustandsdichten des rechten Ferromagneten in paralleler Orientierung für verschiedene Isolatorbandschwerpunkte. Der umrahmte Bereich ist im Inset vergrößert dargestellt. Parameter aus Tab. 5.1.

die Umorientierung der Magnetisierung wird unmöglich. Dies erklärt sowohl, warum der Schaltspunkt mit  $\epsilon_{RP}$  kontinuierlich ansteigt, als auch warum das Schalten bei zu hohem  $\epsilon_{RP}$  komplett abbricht.

Da im linken Ferromagneten nur Spin Up-Zustände in der Nähe der Fermienergie existieren, ist der Hybridisierungseffekt in paralleler Orientierung stärker als in antiparalleler. Im ersten Fall existieren nämlich im rechten Ferromagneten auch mehrheitlich Spin Up-Zustände in der Nähe der chemischen Potentiale, während es im zweiten Fall mehr Spin Down-Zustände sind. Aufgrund des stärker ausgeprägten Hybridisierungseffekts mit dem linken Ferromagneten kann die parallele Orientierung auch bei etwas höheren  $\epsilon_{RP}$  noch umorientiert werden. Die antiparallele Orientierung bleibt aufgrund des im Vergleich dazu schwächeren Hybridisierungseffekts bereits bei niedrigerem  $\epsilon_{RP}$  stabil. Anhand der  $\epsilon_{RP} = 0.1$  eV-Kurve im linken Bild von Abb. 5.24 lässt sich das sehr schön erkennen. Dieser Wert liegt knapp oberhalb der kritischen Hybridisierungsstärke der antiparallelen Orientierung; es kommt also nicht mehr zum Schalten. Aber man sieht an der antiparallelen Magnetisierung, dass das System durchaus noch versucht seine Magnetisierungsrichtung zu drehen. Allerdings ist der Abstoßungseffekt durch den Paramagneten zu groß, so dass dies nicht mehr vollständig gelingt.

Es sollte noch erwähnt werden, dass der Bereich um  $\epsilon_{RP} = 0$  eV im Phasendiagramm ausgespart wurde, da dort die antiparallele Orientierung nicht stabil ist, und dieser Bereich aus Sicht des strominduzierten Schaltens daher keine Rolle spielt.



### 5.6.6 Isolatorbandschwerpunkt $T_{0,I}$

Von den vier Bandschwerpunkten  $T_{0,L}$ ,  $T_{0,I}$ ,  $T_{0,R}$  und  $T_{0,P}$  ist nur der Isolatorbandschwerpunkt frei variierbar. Der linke Bandschwerpunkt wurde als Energienullpunkt gewählt und der paramagnetische Schwerpunkt wurde so angepasst, dass die Potentialdifferenz  $\mu_L - \mu_P$  genau der angelegten Spannung entspricht. Für den rechten Bandschwerpunkt wurde die Annahme  $T_{0,R} = T_{0,L} - V$  gemacht. Er stimmt also ohne anliegende Spannung mit dem linken überein. Diese Annahme ist nicht zwingend erforderlich, aber zur Auswertung sehr praktisch. In Abschnitt 5.7 werden mögliche Alternativen dazu diskutiert. An dieser Stelle wird daher lediglich die Abhängigkeit der Magnetisierung vom Isolatorbandschwerpunkt betrachtet (vgl. Abb. 5.26). Dieser ist dabei natürlich so zu wählen, dass das komplette Isolatorband oberhalb der chemischen Potentiale bleibt, da es ansonsten zu einer endlichen Besetzung des Bandes kommen würde.

Die Magnetisierung im linken Bild von Abb. 5.26 verhält sich in beiden Orientierungen ähnlich. Sie fällt mit steigendem Bandschwerpunkt betragsmäßig annähernd linear ab. Für große Schwerpunkte nähern sich die beiden Magnetisierungskurven immer weiter an. Vergleicht man zunächst dieses Verhalten mit den Magnetisierungskurven in Abhängigkeit der Hybridisierung  $\epsilon_{MI}$  in Abb. 5.21, fällt eine deutliche Ähnlichkeit auf. Die Kurven mit steigendem Bandschwerpunkt verhalten sich nämlich ungefähr genauso, als würde man die Hybridisierungsstärke reduzieren. Dies passiert in Übereinstimmung mit den Erkenntnissen aus dem Zweibandmodell (Abschnitt 5.1), wo gezeigt wurde, dass eine Vergrößerung des energetischen Abstands zwischen den Bändern zumindest qualitativ identisch zu einer Reduzierung der Hybridisierungsstärke ist. Daher kann der lineare Abfall der Magnetisierung komplett analog zum Verhalten in Abhängigkeit von  $\epsilon_{MI}$  verstanden werden. Die Erklärung soll deswegen an dieser Stelle nicht wiederholt werden.

Ohne anliegende Spannung sind beide chemischen Potentiale identisch und liegen für die gewählten Parameter aus Tab. 5.1 bei  $\mu_L = \mu_P \approx 0.18$  eV. Die untere Bandkante des Isolators liegt, bis auf geringe Verschiebungen aufgrund der Hybridisierung, bei etwa  $T_{0,I} - \frac{1}{2}W_I$ . Die Bandbreite ist  $W_I = 1$  eV, damit wäre  $T_{0,I} \approx 0.7$  eV der minimal mögliche Schwerpunkt, bei dem sichergestellt wäre, dass das Isolatorband komplett oberhalb der chemischen Potentiale liegt. Bei der Diskussion der Hybridisierungsstärke wurde jedoch bereits festgestellt, dass  $\epsilon_{MI}$  aus physikalischen Gründen nicht beliebig erhöht werden kann. Es dürfen nur Hybridisierungsstärken, die der Bedingung  $\epsilon_{MI}^4 < |t_R|$  genügen, verwendet werden. Es wurde gezeigt, dass sich bei der maximalen Hybridisierungsstärke  $\epsilon_{MI} = 0.6$  eV, die aufgrund dieser Bedingung möglich ist, das Minoritätsband nach oben über das Majoritätsband hinausschiebt. Da eine Verringerung des Isolatorbandschwerpunkts einer Erhöhung der effektiven Hybridisierungsstärke entspricht, sollte es damit auch eine Untergrenze für den Bandschwerpunkt geben, unterhalb derer die Hybridisierung zu stark wird. Im rechten Bild in Abb. 5.26 ist die Quasiteilchenzustandsdichte des rechten Ferromagneten in paralleler Orientierung für verschiedene Bandschwerpunkte dargestellt. Der interessante Bereich ist zusätzlich im Inset vergrößert gezeigt. Man sieht, dass sich das Spin Down-Band mit sinkendem Bandschwerpunkt zu höheren Energien verschiebt, während das Spin Up-Band sich genau umgekehrt verhält. Oberhalb von  $T_{0,I} = 3$  eV liegt das Spin Down-Band vollständig in der Region endlicher Spin Up-

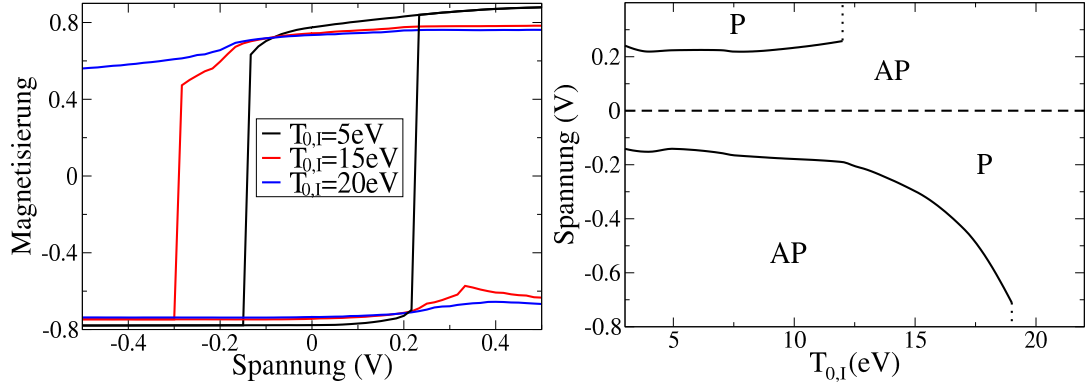


Abbildung 5.27: Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve des rechten Ferromagneten für verschiedene Werte des Isolatorbandschwerpunkts  $T_{0,I}$ . Rechts: Abhängigkeit des Switchingpunkts vom Isolatorbandschwerpunkt. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1.

Zustandsdichte. Für niedrigere Bandschwerpunkte schiebt es sich jedoch darüber hinaus, was darauf hindeutet, dass die effektive Hybridisierungsstärke zu groß wird. Um im physikalisch glaubwürdigen Bereich zu bleiben, sollte der Bandschwerpunkt des Isolators bei der gewählten Hybridisierungsstärke von  $\epsilon_{MI} = 0.5$  eV also nicht unter  $T_{0,I} = 3$  eV liegen. Dieser Wert liegt deutlich über dem aufgrund der Bandbesetzung abgeschätzten Wert von  $T_{0,I} \approx 0.7$  eV. Um niedrigere Bandschwerpunkte zu modellieren, müsste man die Tunnelkopplung  $\epsilon_{MI}$  reduzieren.

Es wurde bereits festgestellt, dass eine Änderung des Bandschwerpunkts zumindest qualitativ mit einer Änderung der Hybridisierungsstärke identisch ist. Höhere Bandschwerpunkte entsprechen geringerer Hybridisierung und umgekehrt. An dieser grundlegenden Tatsache ändert sich auch nach Anlegen einer Spannung nichts wesentliches. Daher entspricht das  $T_{0,I}$ -Phasendiagramm in Abb. 5.27, wiederum zumindest qualitativ, dem gespiegelten  $\epsilon_{MI}$ -Phasendiagramm aus Abb. 5.22. Die Erklärung für das Auftreten der verschiedenen Phasen kann daher auch mehr oder weniger unverändert aus Abschnitt 5.6.4 übernommen werden. Für zu große Bandschwerpunkte wird kein Schalten beobachtet, da der Einfluss der Hybridisierung mit wachsendem energetischen Abstand der Bänder immer schwächer und somit auch der Abstoßungseffekt immer kleiner wird. Gleichzeitig nimmt die Stärke des Stroms ab, es werden also weniger Elektronen zwischen den Ferromagneten ausgetauscht. Oberhalb von  $T_{0,I} = 19$  eV sind beide Orientierungen unabhängig von der angelegten Spannung stabil. Unter  $T_{0,I} = 19$  eV tritt für negative Spannungen ein Übergang von paralleler zu antiparalleler Orientierung auf. Der umgekehrte Übergang bei positiven Spannungen wird erst unterhalb von  $T_{0,I} = 12$  eV beobachtet. Ursache für diese Diskrepanz ist die bereits mehrfach diskutierte Asymmetrie des Stroms bezüglich der Spannungsrichtung bzw. die unterschiedliche Stärke der Hybridisierung für beide Orientierungen. Mit weiter sinkendem Bandschwerpunkt nimmt der Betrag der kritischen Spannung weiter ab, da die effektive Hybridisierung entsprechend

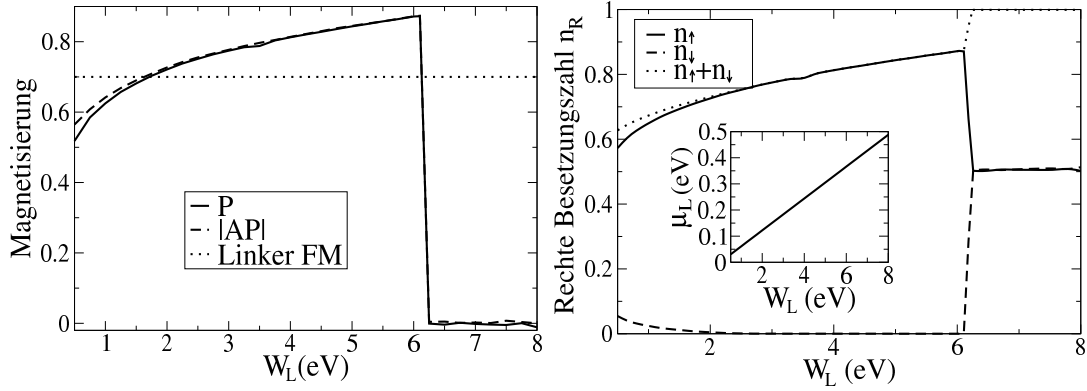


Abbildung 5.28: Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der linken Bandbreite  $W_L$ . Die durchgezogene Linie gilt für parallele, die gestrichelte Linie für antiparallele Ausrichtung der Magnetisierungen. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung eingezeichnet. Außerdem ist die Magnetisierung des linken Ferromagneten gepunktet dargestellt. Rechts: Veränderung der rechten Besetzungszahl  $n_R$  in Abhängigkeit der linken Bandbreite. Im Inset ist das linke chemische Potential  $\mu_L$  gezeigt. Parameter aus Tab. 5.1.

stärker wird. Das Phasendiagramm wird bei  $T_{0,I} = 3$  eV abgebrochen, da noch niedrigere Bandschwerpunkte eine zu hohe effektive Hybridisierungsstärke zur Folge hätten, wie weiter oben begründet wurde.

Die Änderung der kritischen Spannung ist auch an den Magnetisierungskurven im linken Bild von Abb. 5.27 erkennbar. Bei  $T_{0,I} = 5$  eV erhält man eine typische Hysteresekurve. Bei höherem Bandschwerpunkt  $T_{0,I} = 15$  eV zeigt die parallele Orientierung weiterhin Schaltverhalten, allerdings erst bei deutlich höheren Spannungen. Die antiparallele Orientierung wird dagegen lediglich geschwächt. Diese Abschwächung reicht aber nicht zur Umorientierung. Ein ähnliches Phänomen wurde bereits in Abb. 5.24 für größeres  $\epsilon_{RP}$  beobachtet. Bei noch weiter erhöhtem Bandschwerpunkt  $T_{0,I} = 20$  eV bleiben schließlich beide Orientierungen stabil. Die große Ähnlichkeit zwischen dieser Kurve und der  $\epsilon_{MI} = 0.2$  eV-Kurve in Abb. 5.22 ist deutlich erkennbar.

### 5.6.7 Bandbreite $W_L$ des linken Ferromagneten

In diesem Abschnitt wird die Abhängigkeit der rechten Magnetisierung von der Bandbreite  $W_L$  des linken Ferromagneten diskutiert. Sie ist im linken Bild von Abb. 5.28 dargestellt. Man erkennt, dass sie in beiden Orientierungen mit steigender Bandbreite stetig wächst, dann aber bei einem kritischen  $W_L$  plötzlich zusammenbricht. Die kritische Bandbreite ist dabei für beide Ausrichtungen identisch, nämlich  $W_L \approx 6.15$  eV. Ähnlich wie im Fall der  $U_L$ -Abhängigkeit kommt ein solch drastisches Verhalten der rechten Magnetisierung eher unerwartet, insbesondere da die linke Magnetisierung sich aufgrund des hohen  $U_L$  in dem betrachteten Bandbreitenbereich praktisch nicht ändert,

## 5 Numerische Resultate

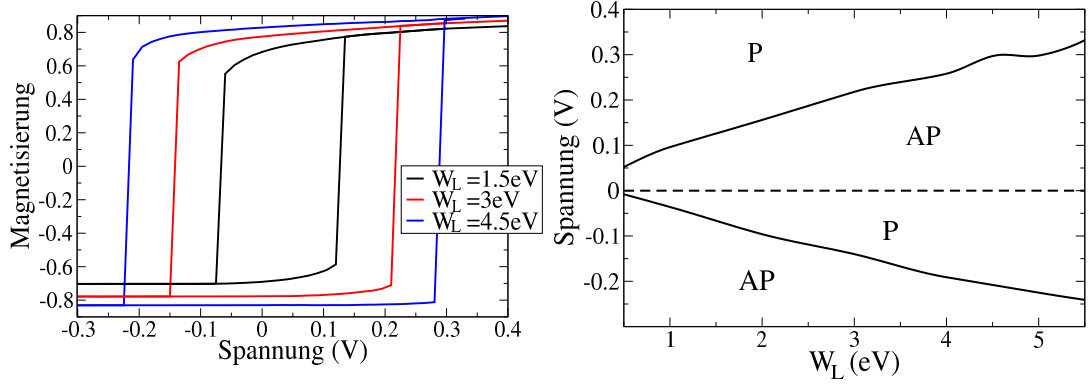


Abbildung 5.29: Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve des rechten Ferromagneten für verschiedene Bandbreiten  $W_L$  des linken Ferromagneten. Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von  $W_L$ . Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1.

wie man anhand der gepunkteten Linie erkennt. Es erscheint daher naheliegend, dass das  $W_L$ - und  $U_L$ -Verhalten letztlich beide auf dieselbe Ursache zurückzuführen sind, d.h. auf eine Verschiebung des linken chemischen Potentials mit entsprechenden Folgen für die rechte Besetzungszahl. Diese Vermutung kann anhand des rechten Bilds in Abb. 5.28 bestätigt werden. Im Inset ist zu erkennen, dass das linke chemische Potential linear mit steigender Bandbreite zunimmt. Dies hat eine wachsende Besetzungszahl im rechten Ferromagnet zur Folge, wodurch auch die rechte Magnetisierung steigt. Außerdem ist zu sehen, dass der rechte Ferromagnet über einen weiten Parameterbereich vollständig polarisiert ist, da  $\langle n_{R,\downarrow} \rangle = 0$  gilt. Das untere Spin Down-Band des rechten Ferromagneten liegt bei paralleler Orientierung oberhalb des linken chemischen Potentials. Dieses rutscht aber mit steigender Bandbreite zu höheren Energien, wie im Inset zu sehen ist. Bei  $W_L \approx 6.1$  eV kommt es schließlich wieder zu endlicher Spin Down-Besetzung, d.h. bei dieser Bandbreite ist das linke chemische Potential in das untere rechte Spin Down-Band hineingerutscht. Dies ist die Ursache für den Zusammenbruch des Magnetismus, da nun keine selbstkonsistente magnetische Lösung mehr existiert. Der antiparallele Fall kann vollkommen analog dazu erklärt werden. Es handelt sich also wiederum im Wesentlichen um einen Besetzungszahleffekt.

Das Phasendiagramm in Abhängigkeit der linken Bandbreite  $W_L$  ist in Abb. 5.29 dargestellt. Das System zeigt für alle untersuchten Bandbreiten das typische Hystereseverhalten, wobei die kritische Spannung in beiden Orientierungen mit steigender Bandbreite  $W_L$  zunimmt. Dies ist auch an den Magnetisierungskurven im linken Bild zu erkennen. Da die linke Magnetisierung im betrachteten Bandbreitenbereich konstant ist, kommt sie nicht als Verursacher des Anstiegs in Frage. Die rechte Magnetisierung nimmt aber mit steigendem  $W_L$  zu, was vor allem der steigenden Besetzungszahl zuzurechnen ist, da auch das chemische Potential  $\mu_L$  mit größerem  $W_L$  nach oben rutscht. Um eine höhere Magnetisierung umzuorientieren, ist aber auch eine höhere Spannung nötig, was bereits

## 5.6 Einfluss der Modellparameter auf das Magnetisierungsverhalten

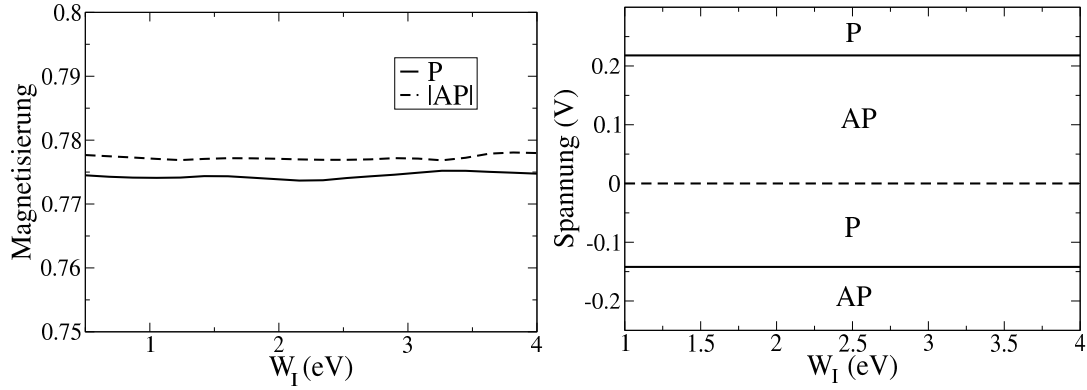


Abbildung 5.30: Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Isolatorbandbreite  $W_I$  für parallele und antiparallele Orientierung der Magnetisierungen ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung dargestellt. Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von der Isolatorbandbreite. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1.

mehrfach in diesem Kapitel festgestellt wurde. Damit kann der Anstieg des Schaltpunkts als direkte Folge der steigenden rechten Magnetisierung erklärt werden. Außerdem wird der Strom mit steigendem  $W_L$  abnehmen, da zwar die Zahl der freien bzw. besetzten Zustände im linken Kontakt konstant bleibt, diese aber über einen breiteren Energiebereich verteilt werden. Damit sind für eine vorgegebene Spannung, verglichen mit der Situation geringerer Bandbreite, weniger Zustände am Transport beteiligt. Das Phasendiagramm wird bei  $W_L = 5.5$  eV abgebrochen, da für noch höhere Bandbreiten, als Folge der steigenden Besetzungszahl, sowohl die parallele als auch die antiparallele Phase instabil werden (vgl. Abb. 5.28). In diesem Bereich kann daher natürlich auch kein Schalten auftreten.

### 5.6.8 Isolatorbandbreite $W_I$

Die Abhängigkeit der Magnetisierung von der Bandbreite des Isolators ohne anliegende Spannung ist im linken Bild von Abb. 5.30 gezeigt. Offenbar hat  $W_I$  kaum Einfluss auf ihren Wert. Natürlich gilt diese Aussage nur, solange die Bandbreite nicht so groß wird, dass die untere Isolatorbandkante unter eines der beiden chemische Potentiale rutscht. Dann würde der Isolator allerdings zum Metall und der Tunnelstrom zum direkten Strom. Dies entspricht nicht der Situation, die in dieser Arbeit modelliert werden soll. Daher wurde der Bandbreitenbereich in der Abbildung so gewählt, dass dieser Fall nicht auftritt. Da der Bandschwerpunkt mit  $T_{0,I} = 5$  eV deutlich oberhalb der besetzten Zustände liegt, kann das Isolatorband also auch keinen direkten Einfluss auf sie ausüben. Lediglich die Zustände, die durch die Hybridisierung mit dem linken Ferromagneten entstehen, sind für die Magnetisierung von Bedeutung (vgl. die Quasiteilchenzustandsdichten der

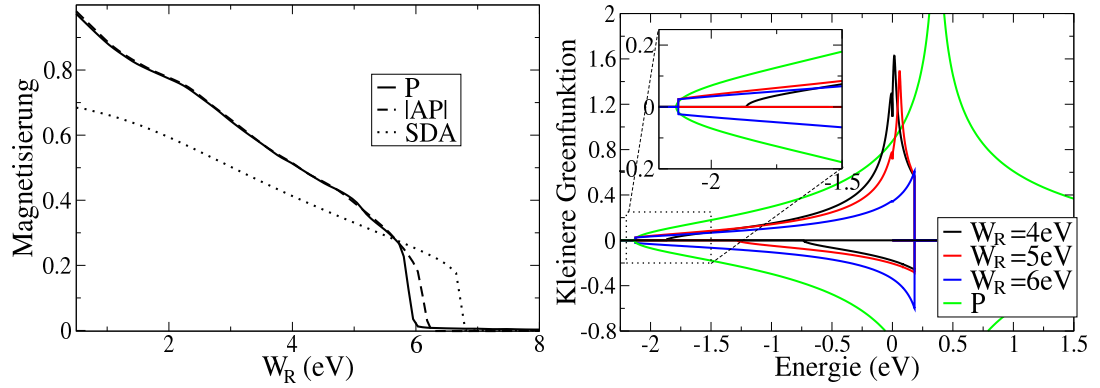


Abbildung 5.31: Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der rechten Bandbreite  $W_R$  für parallele und antiparallele Orientierungen ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung und die SDA-Magnetisierung eingezeichnet. Rechts: Imaginärteil der wellenzahlgemittelten rechten kleineren Greenfunktion  $\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_R} G_{\mathbf{k}_R \sigma}^<(E)$  für verschiedene Bandbreiten und parallele Orientierung. Der eingerahmte Bereich ist zusätzlich im Inset vergrößert dargestellt. Außerdem ist die paramagnetische Zustandsdichte (grüne Linie) eingezeichnet.

Tunnelstruktur in Abb. 5.10). Anhand des einfachen Zweibandmodells in Abschnitt 5.1 konnte aber bereits gezeigt werden, dass die Bandbreite für die Hybridisierung nicht entscheidend ist. Insbesondere ist die Abstoßung der Bänder von ihr unabhängig. Damit kann die Isolatorbandbreite also auch keinen Einfluss auf die Magnetisierung haben. Da die Abstoßung beim Schalten eine zentrale Rolle spielt, folgt daher, dass die Bandbreite des Isolators auch keine Veränderung der kritischen Spannung bewirken sollte. Dies wird anhand des rechten Bilds in Abb. 5.30 bestätigt. Die Grenzen zwischen den Phasen sind einfache horizontale Linien, da die kritischen Spannungen für alle Bandbreiten dieselben sind. Die spannungsabhängigen Magnetisierungskurven sind nicht dargestellt, da sie für alle  $W_I$  identisch wären und daher keine neue Information liefern würden. Der Einfluss der Isolatorbandbreite kann also bei der Diskussion des Schaltverhaltens vernachlässigt werden. Dies deckt sich mit den Ergebnissen anderer Autoren, die ebenfalls herausgefunden haben, dass die Materialeigenschaften des Isolators, von seinem Bandschwerpunkt abgesehen, für den Tunnelprozess keine Rolle spielen [129].

### 5.6.9 Bandbreite $W_R$ des rechten Ferromagneten

Die Abhängigkeit der Magnetisierung des rechten Ferromagneten von seiner Bandbreite im linken Bild von Abb. 5.31 weist für beide Orientierungen starke Ähnlichkeit zur Bandbreitenabhängigkeit der SDA auf, deren Magnetisierung ebenfalls eingezeichnet ist. Beginnend bei  $W_R = 0.5$  eV nimmt die Magnetisierung mit steigender Bandbreite stetig ab, um schließlich bei einer kritischen Bandbreite zusammenzubrechen. Diese kriti-

## 5.6 Einfluss der Modellparameter auf das Magnetisierungsverhalten

sche Bandbreite ist für parallele Orientierung etwas kleiner als für antiparallele, nämlich  $W_R \approx 6$  eV verglichen mit  $W_R \approx 6.2$  eV. Die NSDA-Magnetisierung bricht somit unabhängig von der Orientierung früher zusammen als die der SDA, die bei den gewählten Parametern bis  $W_R \approx 6.7$  eV stabil ist. Dafür ist der Magnetisierungswert unterhalb der kritischen Bandbreiten in der NSDA praktisch durchgehend höher als der der SDA. Der Hauptgrund hierfür ist natürlich wiederum die Veränderung der Nichtgleichgewichtsbesetzungszahl im rechten Ferromagneten. Das chemische Potential der beiden Kontakte hängt nicht vom rechten Bandschwerpunkt ab und beträgt konstant  $\mu_L = \mu_P \approx 0.18$  eV, d.h. es liegt oberhalb des rechten Bandschwerpunkts  $T_{0,R} = 0$  eV. Durch Verringerung der Bandbreite liegt somit ein immer größerer Teil der rechten Zustandsdichte unterhalb von  $\mu_L$ , was zu einer deutlichen Steigerung der Besetzungszahl führt. Allein dieser Teilchenzahleffekt würde also bereits zu einer steigenden Magnetisierung führen (vgl. Abb. 5.13). In der SDA ist die Besetzungszahl  $n = 0.7$  dagegen fest vorgegeben, daher kann die Magnetisierung nie über diesen Wert steigen. Zusätzlich kommt noch hinzu, dass geringere Bandbreiten schon in der SDA zu größeren Magnetisierungen führen, da dadurch die effektive Wechselwirkungsstärke  $U_R/W_R$  erhöht wird. Dieser Effekt ist in der NSDA ebenfalls vorhanden und unterstützt den Anstieg mit sinkender Bandbreite noch weiter.

Bei allen bisher diskutierten Parametern hat sich erwiesen, dass die NSDA im Vergleich zur SDA stabileren Magnetismus liefert. Daher überrascht es zunächst, dass die Magnetisierung in Abhängigkeit der rechten Bandbreite zuerst für die NSDA zusammenbricht. Dabei handelt es sich jedoch nicht um einen physikalischen Effekt, sondern wiederum um ein Artefakt der verwendeten Näherung. Die kleinere Tunnelselbstenergie, die, wie bereits in Abschnitt 5.6.5 erwähnt, etwas vereinfacht folgendermaßen geschrieben werden kann:

$$\Delta_{R\sigma}^<(E) \propto \alpha(E) \epsilon_{MI}^4 f_L(E) \rho_{L,\sigma}(E) + \epsilon_{RP}^2 f_P(E) \rho_{P,\sigma}(E) \quad (5.11)$$

ist höchstens bei solchen Energien von Null verschieden, bei denen der linke Ferromagnet oder der Paramagnet endliche Zustandsdichten haben. Nur diese Energien können einen Beitrag zur Besetzungszahl und damit zur Magnetisierung liefern. Für zu große  $W_R$  wird die rechte QDOS aber über die beiden Zustandsdichten der Kontakte hinausragen. Das führt dazu, dass die tiefliegenden Zustände im rechten Ferromagneten nicht mehr besetzt werden können. Im rechten Bild von Abb. 5.31 ist die wellenzahlgemittelte kleinere rechte Greenfunktion  $1/N \sum_{\mathbf{k}_R} G_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E)$  für verschiedene Bandbreiten  $W_R$  dargestellt. Zum Vergleich ist zusätzlich die Zustandsdichte des Paramagneten eingezeichnet. Dessen Bandbreite  $W_P = 5$  eV wurde bewusst deutlich größer als die Standardbandbreite  $W_R = 2$  eV des rechten Ferromagneten gewählt, damit beide Spinrichtungen endliche Besetzung aufweisen. Anhand der Abbildung ist klar erkennbar, dass die rechten Zustände, die nach unten über die paramagnetischen Zustände hinausragen, keinen Beitrag zur kleineren Greenfunktion liefern. Sie wird an der unteren Bandkante des Paramagneten abgeschnitten, was aufgrund von Gleichung (5.11) auch zu erwarten war. Damit tritt die unphysikalische Situation auf, dass gerade die energetisch tiefliegenden Zustände nicht besetzt werden, während höherenergetische Zustände durchaus endliche Besetzungen aufweisen. Ähnlich wie im Fall der Hybridisierungsstärke  $\epsilon_{RP}$  gibt es zwei Möglichkei-

## 5 Numerische Resultate

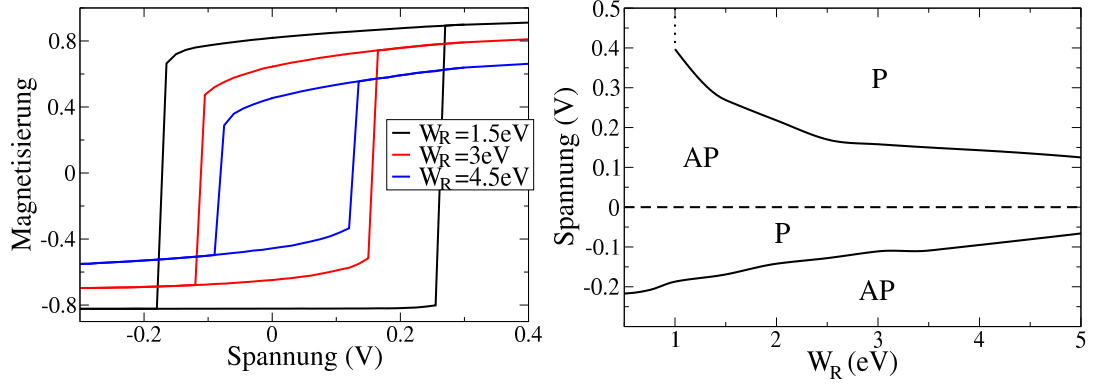


Abbildung 5.32: Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve des rechten Ferromagneten für verschiedene Bandbreiten  $W_R$ . Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von der rechten Bandbreite. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1.

ten dieses Problem zu vermeiden. Erstens kann man sich natürlich einfach auf solche Bandbreiten beschränken, bei denen das rechte Band nicht über die Zustandsdichten der Kontakte hinausragt. Dies stellt keine sehr schwerwiegende Einschränkung dar, da sie praktisch von allen experimentell verwendeten Tunnelstrukturen erfüllt wird. Im Experiment sind die beiden Ferromagnete üblicherweise aus demselben Material, haben also auch dieselbe (Volumen-)Bandbreite. Da der rechte Ferromagnet aber deutlich dünner als der linke ist, schrumpft seine Bandbreite auf bis zu  $\frac{2}{3}$  der Volumenbandbreite im Grenzfall einer einzigen atomaren Schicht [118]. Außerdem weisen die Paramagnete typischerweise größere Bandbreiten als die Bandferromagnete auf, die sich ja gerade durch ihre relativ schmalen Bänder auszeichnen [130]. Damit ist die Bedingung  $W_R < W_L, W_P$  im Experiment also praktisch immer erfüllt. Die zweite Möglichkeit dieses Problem zu umgehen, besteht in einer Erweiterung der Theorie auf endliche kleinere Wechselwirkungsselbstenergien, wie es bereits in Abschnitt 5.6.5 diskutiert wurde. Damit könnte dann auch der Bereich  $W_R > W_L, W_P$  untersucht werden.

Auch das Verhalten der kritischen Spannung in Abhängigkeit von der rechten Bandbreite in Abb. 5.32 folgt im Wesentlichen dem der Magnetisierung aus Abb. 5.31. Die Ursache dafür liegt, wie bereits mehrfach diskutiert, in der geringeren Stabilität der Magnetisierung mit steigender Bandbreite. Dadurch wird das Schalten erleichtert. Die kritische Spannung nimmt also mit steigendem  $W_R$  ab. Bei der Veränderung der rechten Bandbreite ist darauf zu achten, dass das rechte Band nicht über die Bänder des linken Ferromagneten bzw. des Paramagneten hinausragt. Daher ist mit  $W_P = 5 \text{ eV}$  die Obergrenze für  $W_R$  festgelegt. Bei kleinen  $W_R$  und positiver Spannung tritt kein Übergang zu paralleler Orientierung mehr auf. Auch für andere Parameter, wie z.B. der Hybridisierungsstärke  $\epsilon_{RP}$  oder dem Isolatorbandschwerpunkt  $T_{0,I}$ , wurde die antiparallele Orientierung deutlich vor der parallelen stabil, d.h. sie konnte durch Anlegen einer Spannung nicht mehr umorientiert werden. Dieser Effekt wurde mit der geringeren



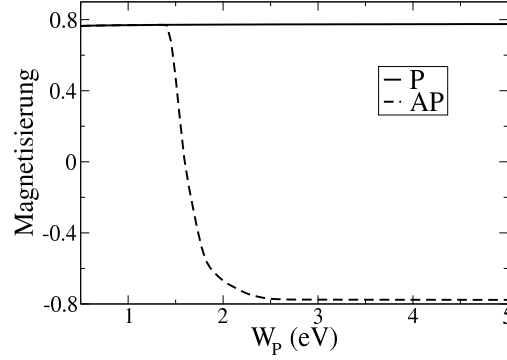


Abbildung 5.33: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Bandbreite  $W_P$  des Paramagnets für parallele und antiparallele Orientierung der Magnetisierungen ohne anliegende Spannung. Parameter aus Tab. 5.1.

Stromstärke bzw. schwächeren effektiven Hybridisierung zwischen den beiden Ferromagneten in antiparalleler verglichen mit paralleler Ausrichtung erklärt. Genau dies ist auch die Ursache für die Stabilität der AP-Phase bei kleinen  $W_R$ .

#### 5.6.10 Bandbreite $W_P$ des Paramagneten

Die Bandbreite des Paramagneten hat keinen Einfluss auf die Magnetisierung in paralleler Ausrichtung, wie in Abb. 5.33 zu erkennen ist. Die antiparallele Magnetisierung andererseits hängt sehr deutlich von  $W_P$  ab. Für zu kleine Bandbreiten ist sie nicht stabil und das System ist immer parallel orientiert. Erst ab  $W_P = 1.4$  eV unterscheiden sich die Magnetisierungskurven, da die antiparallele Magnetisierung stark abfällt und ab etwa  $W_P = 2.5$  eV in ihren (negativen) Sättigungswert übergeht. Dieser stimmt betragsmäßig mit dem der parallelen Ausrichtung überein. Da der Paramagnet keine Spinvorzugsrichtung hat, würde man keinen ausgeprägten Einfluss auf die Magnetisierung erwarten. Daher liegt erneut die Vermutung nahe, dass es sich, wie bereits bei der rechten Bandbreite, um ein Artefakt der NSDA handelt. Dies ist in der Tat der Fall. Es wurde bereits im letzten Abschnitt festgestellt, dass die rechte Bandbreite  $W_R$  nicht so groß werden darf, dass sie über die anderen Bänder hinausragt, da sonst tiefliegende Zustände nicht mehr besetzt werden. Durch eine Verringerung von  $W_P$  tritt aber genau dieser Effekt ein. Die antiparallele Magnetisierung wird daher genau dann instabil, wenn  $W_P$  in etwa  $W_R = 2$  eV entspricht. Allerdings sind davon, im Gegensatz zur Diskussion der rechten Bandbreite, nur Spin Down-Zustände betroffen. Da  $W_R < W_L$  gewählt wurde, liegen nämlich sämtliche Spin Up-Zustände des rechten Ferromagneten im Bereich endlicher Spin Up-Zustandsdichte des linken Ferromagneten. Daher ist nach Gleichung (5.11) die kleinere Spin Up-Tunnelselbstenergie von Null verschieden und die entsprechende Besetzungszahl somit endlich. Wegen der Mean Field-Aufspaltung auf der linken Seite gilt dies aber nicht für Spin Down-Zustände. Diese können also unterhalb der Bandkante des Paramagneten grundsätzlich nicht besetzt sein, wodurch die Spin Down-Besetzungszahl zu niedrig berechnet wird, was letztlich für zu kleine Bandbreiten zum Zusammenbrechen

## 5 Numerische Resultate

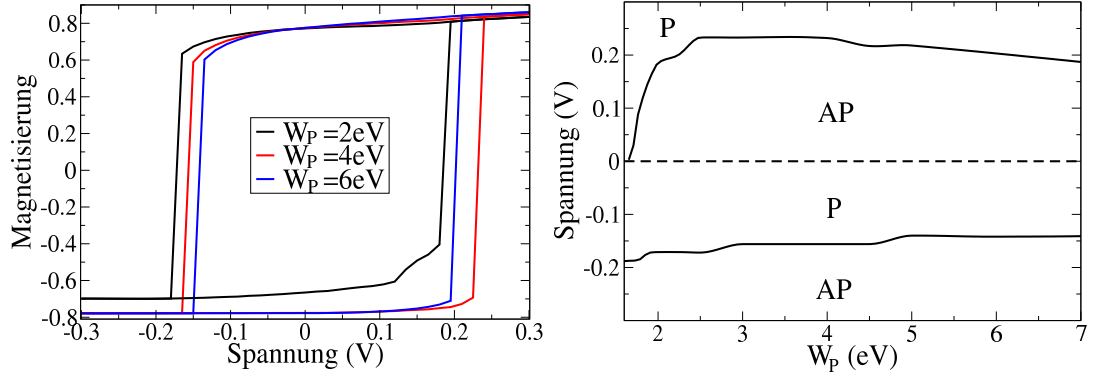


Abbildung 5.34: Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve des rechten Ferromagneten für verschiedene Bandbreiten  $W_P$  des Paramagneten. Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von  $W_P$ . Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1.

der antiparallelen Magnetisierung führen muss. Wäre dieses Artefakt nicht vorhanden, würde auch die antiparallele Kurve keine ausgeprägte Abhängigkeit von der paramagnetischen Bandbreite zeigen.

Das Phasendiagramm in Abhängigkeit von  $W_P$  ist in Abb. 5.34 gezeigt. Unterhalb von  $W_P \approx 1.6\text{ eV}$  existiert bei  $V = 0$  nur die parallele Phase, daher ist das Phasendiagramm nur für Werte, die darüber liegen dargestellt. Bei  $W_P = 1.6\text{ eV}$  ist die Magnetisierung des rechten Ferromagneten in antiparalleler Orientierung noch praktisch Null. Daher wird ein beliebig kleiner positiver Strom das System parallel ausrichten. Bei negativen Spannungen kommt es hingegen auch bei kleinen Bandbreiten zum Übergang von paralleler zu antiparalleler Orientierung, d.h. mit anliegender Spannung wird auch die antiparallele Phase wieder stabil.

Für Bandbreiten über  $W_P = 1.6\text{ eV}$  tritt die antiparallele Konfiguration auch ohne anliegende Spannung auf, wodurch es zu einem Hystereseverhalten kommt. Da die Magnetisierung in diesem Bereich betragsmäßig stark ansteigt, wird auch die kritische Spannung schnell größer, um ab  $W_P = 2.5\text{ eV}$  zunächst in ein stabiles Plateau überzugehen. Mit weiter steigender Bandbreite nimmt die kritische Spannung jedoch wieder leicht ab. Ein analoges Verhalten zeigt sich bei negativen Spannungen. Da die Magnetisierung in diesem Bereich für  $V = 0$  im Wesentlichen unverändert bleibt (vgl. Abb. 5.33) ist durchgehend Schalten zu beobachten, aber auch hier sinkt die kritische Spannung mit wachsendem  $W_P$  betragsmäßig leicht ab. Der Grund für dieses Verhalten kann anhand der Quasiteilchenzustandsdichte in Abb. 5.25 erläutert werden. Dort wurde festgestellt, dass das paramagnetische Band genau zwischen den beiden unteren Spinbändern liegt. Damit diese ihre Positionen tauschen können, müssen sie also die Abstoßung aufgrund der Hybridisierung überwinden und durch das paramagnetische Band hindurchrutschen. Ob dies möglich ist, hängt natürlich vor allem von der Stärke der Hybridisierung  $\epsilon_{RP}$  ab. Aber auch die Bandbreite  $W_P$  hat in diesem Fall - im Gegensatz zu der Isolatorbandbreite  $W_I$

## 5.6 Einfluss der Modellparameter auf das Magnetisierungsverhalten

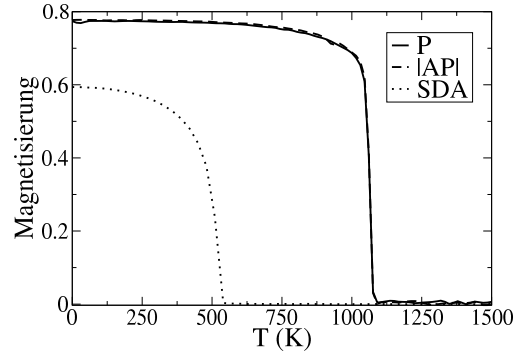


Abbildung 5.35: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Temperatur ohne anliegende Spannung. Die durchgezogene Linie entspricht paralleler, die gestrichelte Linie antiparalleler Orientierung der Magnetisierungen. Zur besseren Vergleichbarkeit ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung und die SDA-Magnetisierung dargestellt. Parameter aus Tab. 5.1.

- einen Einfluss, da sie stark mit den ferromagnetischen Bändern überlappt. Die Stärke der Abstoßung hängt vom spektralen Gewicht ab, wie in Abschnitt 5.1 gezeigt werden konnte. Wenn das paramagnetische Band sehr schmal ist, liegen viele paramagnetische Zustände zwischen den beiden Spinbändern des rechten Ferromagneten. Entsprechend groß ist die Abstoßung zwischen ihnen, wodurch eine höhere Spannung benötigt wird, um Schalten zu ermöglichen. Mit steigender Bandbreite  $W_P$  ragt das paramagnetische Band aber zusehends über die ferromagnetischen Bänder hinaus. Deshalb nimmt das spektrale Gewicht zwischen den rechten Spin Up- und Down-Bändern ab. Dadurch wird das Schalten erleichtert und die kritische Spannung sinkt. Der Effekt ist offenbar umso stärker, je breiter das paramagnetische Band wird, da dann umso mehr Zustände nach oben bzw. unten über die unteren Hubbard-Bänder des rechten Ferromagneten hinausragen. Dadurch ist klar, dass in beiden Orientierungen die kritische Spannung mit steigendem  $W_P$  sinken muss, wie es im Phasendiagramm beobachtet wird.

### 5.6.11 Temperatur $T$

Der letzte verbleibende Parameter ist die Temperatur  $T$ . In Abb. 5.35 wird ersichtlich, dass parallele und antiparallele Orientierung (bis auf das Vorzeichen) identisches Temperaturverhalten zeigen. Insbesondere haben beide Ausrichtungen dieselbe Curie-Temperatur, die in diesem Fall  $T_C=1070$  K beträgt. Im Hinblick auf reale Materialien ist dieser Wert durchaus als realistisch einzuschätzen. Die Curie-Temperatur von Eisen, das oft für die Herstellung magnetischer Tunnelstrukturen verwendet wird, beträgt beispielsweise 1040 K [131]. Die SDA würde hingegen bei identischen Parametern ein  $T_C^{SDA}$  von lediglich 540 K liefern. Die erhöhte thermische Stabilität der Nichtgleichgewichtsmagnetisierungen beruht auf der Kopplung an den linken Ferromagneten. Da dieser in Mean Field-Näherung mit großem  $U_L$  behandelt wird, ist er bei den betrachte-

## 5 Numerische Resultate

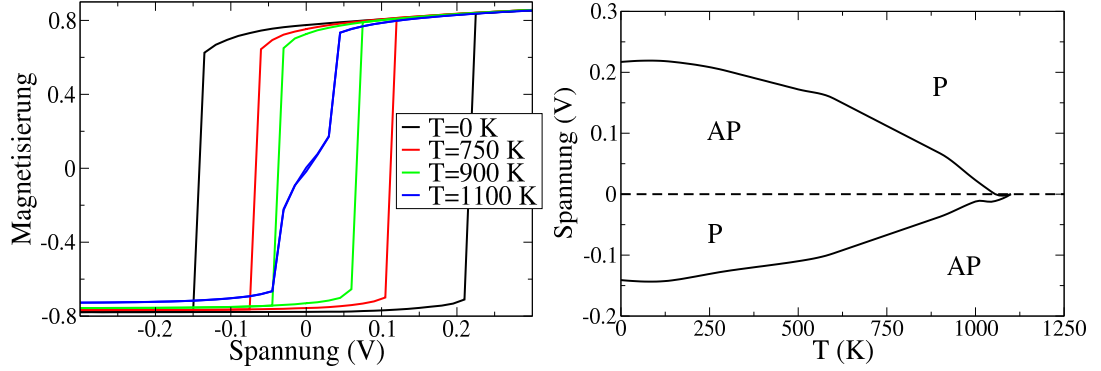


Abbildung 5.36: Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve für verschiedene Temperaturen  $T$ . Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von der Temperatur. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1.

ten Temperaturen noch vollständig polarisiert und erzeugt über die Hybridisierung ein Ungleichgewicht zwischen den beiden Spinrichtungen im rechten Ferromagnet. Dadurch wird das Entstehen einer spontanen Magnetisierung erleichtert. Der Gesamtverlauf der beiden NSDA-Magnetisierungen ist qualitativ sehr ähnlich zur SDA und zeigt das typische Verhalten einer temperaturabhängigen Magnetisierungskurve, d.h. ein zunächst recht flach verlaufender Rückgang mit anschließendem starken Abfall in der Nähe der Curie-Temperatur  $T_C$ .

Die Magnetisierungskurven bzw. das Phasendiagramm in Abb. 5.36 sind mit Hilfe des in diesem Abschnitt bereits gesammelten Wissens relativ leicht zu verstehen. Im Phasendiagramm ist die Curie-Temperatur von  $T_C = 1070$  K deutlich erkennbar, weil die kritische Spannung gerade bei dieser Temperatur gegen Null geht. Insgesamt ist zu beobachten, dass der Schaltpunkt im Wesentlichen dem Verhalten der Magnetisierung folgt. Für  $T = 0$  K ist der Betrag der kritischen Spannung maximal, nimmt anschließend mit steigender Temperatur zunächst langsam, dann aber immer schneller ab, um bei der Curie-Temperatur auf Null zu sinken. Dieses Verhalten ist plausibel, da es mit sinkender Magnetisierung natürlich leichter zur Umorientierung kommen kann, d.h. ein geringerer Strom, und damit auch eine geringere Spannung, reichen bereits zum Schalten aus. Dies wurde auch bei mehreren anderen Phasendiagrammen beobachtet. Oberhalb der Curie-Temperatur liegt für positive Spannungen immer parallele und für negative Spannungen immer antiparallele Orientierung vor. Auch dieser Effekt konnte bereits bei einigen anderen Parametern beobachtet werden und wurde darauf zurückgeführt, dass positive Spannungen einen Zufluss bzw. negative Spannungen einen Abfluss von Spin Up-Elektronen zur Folge haben, mit entsprechenden Auswirkungen auf die Magnetisierung. Dies ist auch anhand der Magnetisierungskurven im linken Bild gut zu erkennen. Für Temperaturen unterhalb von  $T_C$  ergibt sich das übliche Hystereseverhalten, wobei die Schleife mit steigender Temperatur aber immer kleiner wird. Oberhalb der Curie-

Temperatur (blaue Kurve) liegen dann schließlich beide Äste genau übereinander, d.h. der Zustand des Systems ist eindeutig und damit unabhängig von der Ausgangssituation. Er wird allein durch das Vorzeichen der Spannung bestimmt.

## 5.7 Wahl des rechten Bandschwerpunkts

In den letzten Abschnitten wurde das Verhalten des Modells in Abhängigkeit einer ganzen Reihe von Modellparametern untersucht. Ein Parameter, nämlich der Bandschwerpunkt  $T_{0,R}$  des rechten Ferromagneten, wurde dabei jedoch bewusst außer Acht gelassen. Bei allen bisherigen Rechnungen wurde er über  $T_{0,R} = T_{0,L} - V$  durch den linken Bandschwerpunkt und die anliegende Spannung festgelegt. Diese Wahl ist aus mehreren Gründen sinnvoll. Erstens ist durch sie automatisch sichergestellt, dass die (teilweise) besetzten Spinbänder beider Ferromagnete für  $V = 0$  unabhängig von der verwendeten Näherung (Mean Field, SDA, NSDA) auf einer Höhe liegen, d.h. dass überhaupt Stromfluss zwischen den Materialien möglich ist. Zweitens wird auch der Bandschwerpunkt des Paramagneten aufgrund der Bedingung  $\mu_L - \mu_P = V$  um  $V$  verschoben. Damit bleiben also die Bänder des rechten Ferromagneten und des Paramagneten relativ zueinander immer auf der gleichen Höhe. Durch diese Wahl ist also insbesondere ausgeschlossen, dass die ferromagnetische Zustandsdichte ab einer gewissen Spannung über die paramagnetische hinausragen kann. Dies würde zu unphysikalischem Verhalten, wie der Nichtbesetzung von energetisch tiefliegenden Zuständen, führen, wie unter anderem in Abschnitt 5.6.9 diskutiert wurde. Ein weiterer Vorteil besteht darin, dass die Bedingung  $T_{0,R} = T_{0,L} - V$  sehr einfach zu berechnen ist; es entsteht also kein hoher numerischer Aufwand. Andererseits ist diese Wahl natürlich keineswegs die einzige Möglichkeit den rechten Bandschwerpunkt festzulegen. Daher sollen in diesem Abschnitt denkbare Alternativen dazu diskutiert werden. Die erste und offensichtlichste Alternative ist,  $T_{0,R}$  als eigenständigen Parameter zu betrachten, der unabhängig von den anderen Bandschwerpunkten variiert werden kann. Andere Möglichkeiten der Modellierung bestehen darin, den Bandschwerpunkt durch zusätzliche Vorgaben selbstkonsistent zu bestimmen. Diese zusätzlichen Vorgaben können sich entweder auf das chemische Potential oder auf die Besetzungszahl des rechten Ferromagneten beziehen. Alle diese Alternativen haben Vor- und Nachteile, die im Folgenden im Detail diskutiert werden.

In Abb. 5.37 ist das Verhalten der Magnetisierung des rechten Ferromagneten in Abhängigkeit seines Bandschwerpunkts dargestellt. Man erkennt unmittelbar, dass die Magnetisierung in beiden Orientierungen nur in einem schmalen Bereich um den Nullpunkt, der mit dem linken Bandschwerpunkt  $T_{0,L}$  identisch ist, stabil ist. Bereits bei, im Vergleich zur Bandbreite von  $W_R = 2$  eV, geringen Verschiebungen von etwa 0.2 eV bricht sie zusammen. Dieses Verhalten lässt sich auf die Änderung der rechten Besetzungszahl, die in der Abbildung als gepunktete Linie dargestellt ist, zurückführen. Die chemischen Potentiale der beiden Kontakte werden nicht durch den rechten Bandschwerpunkt beeinflusst. Damit führt eine Verringerung von  $T_{0,R}$  dazu, dass ein größerer Teil der rechten QDOS unterhalb dieser Potentiale liegt, wodurch die Besetzungszahl erhöht wird. Entsprechend wird sie mit höherem Bandschwerpunkt sinken. Allerdings verläuft die Änderung der

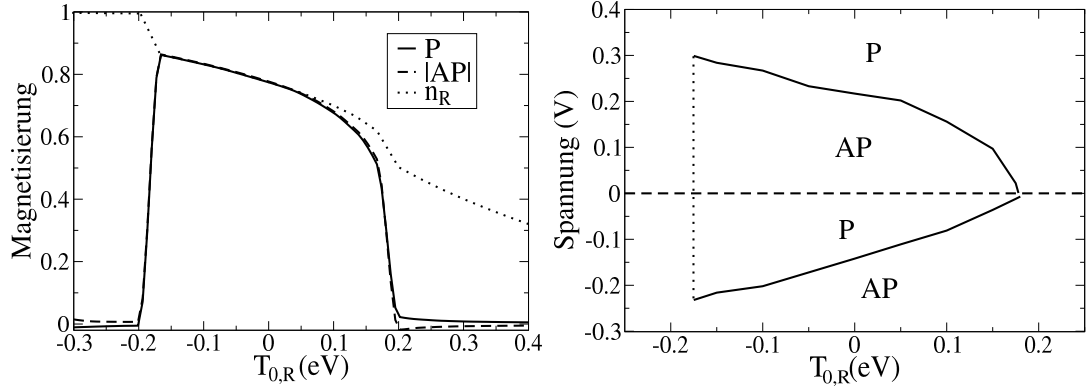


Abbildung 5.37: Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion seines Bandschwerpunkts  $T_{0,R}$  in paralleler und antiparalleler Orientierung ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung dargestellt. Die Gesamtbesetzungszahl  $n_R$  des rechten Ferromagneten ist zusätzlich als gepunktete Linie eingezeichnet. Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung vom rechten Bandschwerpunkt. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1.

Teilchenzahl offenbar nicht linear. Bei niedrigen Bandschwerpunkten  $T_{0,R} < -0.2$  eV ist sie praktisch konstant, da in diesem Bereich das gesamte untere Hubbard-Band in beiden Spinrichtungen unterhalb der chemischen Potentiale liegt. Daher kann auch eine weitere Absenkung des Bandschwerpunkts die Besetzungszahl nicht weiter erhöhen, es sei denn, man würde den Schwerpunkt so weit verringern, dass auch die oberen Hubbard-Bänder unter die Potentiale geschoben werden. Dieser Fall soll hier aber nicht untersucht werden. Knapp unter  $T_{0,R} = 0.2$  eV liegt das Hauptmaximum des rechten Majoritätsspinbands genau auf der Höhe des chemischen Potentials (vgl. die QDOS in Abb. 5.10). Daher führt eine weitere Erhöhung des Bandschwerpunkts zu einem deutlichen Abfall der rechten Besetzungszahl. Wenn der Bandschwerpunkt  $T_{0,R} = 0.2$  eV überschreitet, sinkt sie unter 0.55 ab. Dort liefert die NSDA keine selbstkonsistente Magnetisierung mehr, so dass beide Orientierungen in die paramagnetische Phase übergehen. Für weiter steigende Bandschwerpunkte nimmt die Besetzungszahl linear ab und die Magnetisierung bleibt konstant Null. In beiden Orientierungen sind die Magnetisierungen also nur für  $|T_{0,R}| < 0.2$  eV stabil. Zwischen  $T_{0,R} \approx -0.16$  eV und  $T_{0,R} \approx 0.06$  eV liegt sogar Sättigung, d.h.  $m_R = n_R$ , vor.

Für die Diskussion des Schaltens ist somit nur ein kleiner Bereich um den Energienullpunkt von Interesse. Dies wird durch das Phasendiagramm, das im rechten Bild von Abb. 5.37 zu sehen ist, bestätigt. Im Bereich, wo keine selbstkonsistente Magnetisierung vorliegt, d.h. für  $|T_{0,R}| > 0.2$  eV, tritt selbstverständlich auch kein Schalten auf. Bedingt durch den Strom ergibt sich bei positiven Spannungen immer parallele Ausrichtung, bei negativen Spannungen dagegen immer antiparallele Ausrichtung. Zwischen  $T_{0,R} = -0.2$

eV und  $T_{0,R} = 0.2$  eV, also in dem Bereich, in dem endliche Magnetisierung im rechten Ferromagneten vorliegt, ist auch Hystereseverhalten zu beobachten. Dabei sinkt die kritische Spannung mit steigendem Bandschwerpunkt kontinuierlich ab. Dies ist eine unmittelbare Folge des Rückgangs der Magnetisierung, die in diesem Bereich aufgrund der sinkenden Gesamtbesetzungszahl ebenfalls abnimmt. Zur Modellierung des Schaltens darf der rechte Bandschwerpunkt ohne anliegende Spannung also nur in einem schmalen Bereich um den linken Bandschwerpunkt  $T_{0,L}$  variiert werden. Daher kann die Wahl  $T_{0,R} = T_{0,L} - V$ , die dies automatisch sicherstellt, auch anhand der numerischen Ergebnisse begründet werden.

Alternativ kann der rechte Bandschwerpunkt über das chemische Potential festgelegt werden. Dazu wird gefordert, dass die chemischen Potentiale der ungekoppelten Schichten ohne anliegende Spannung identisch sein sollen:

$$\mu_L \stackrel{!}{=} \mu_R^{(eq)} \stackrel{!}{=} \mu_P \quad (5.12)$$

Der Index  $(eq)$  am rechten chemischen Potential soll andeuten, dass es sich um das Gleichgewichtspotential bei verschwindender Tunnelkopplung handelt. Dies ist wichtig, da das rechte chemische Potential im Nichtgleichgewicht nicht definiert werden kann. Die auf Gleichung (5.12) basierende Bedingung wird im Folgenden aus offensichtlichen Gründen  $\mu$ -Bedingung genannt. Die Beziehung  $\mu_L = \mu_P$  ist durch die Konstruktion des Modells für  $V = 0$  automatisch erfüllt. Es muss also lediglich der rechte Bandschwerpunkt so verschoben werden, dass das erste Gleichheitszeichen gilt. Dies stellt eine zusätzliche Selbstkonsistenzbedingung an die Theorie dar. Da es sich lediglich um eine Bedingung für Gleichgewichtsgrößen handelt, ist der numerische Mehraufwand, der zur Lösung nötig ist, überschaubar. Für eine typische Magnetisierungskurve dauern die Rechnungen mit der Selbstkonsistenzbedingung (5.12) im Vergleich zur identischen Rechnung mit fest vorgegebenem Bandschwerpunkt  $T_{0,R} = T_{0,L} - V$  nur etwa 10 Sekunden länger.

Als zweite Alternative kann die Besetzungszahl  $n_R$  des rechten Ferromagneten ohne anliegende Spannung vorgegeben werden. Der Bandschwerpunkt muss dann wiederum selbstkonsistent so gewählt werden, dass die Bedingung

$$n_R(V = 0) \stackrel{!}{=} n_0 \quad (5.13)$$

bei vorgegebener Besetzungszahl  $n_0$  erfüllt ist. Sie wird im Weiteren  $n$ -Bedingung genannt. Dabei liegt es nahe,  $n_0$  identisch zu der ebenfalls vorgegebenen Besetzungszahl  $n$  der beiden Kontakte zu wählen. Dies ist natürlich nicht zwingend notwendig, wird im Folgenden aber so gehandhabt.  $n_R$  muss dabei aus der vollen Greenfunktion berechnet werden, daher handelt es sich im Gegensatz zu Gleichung (5.12) um eine Nichtgleichgewichtsbedingung. Zwar muss sie pro Magnetisierungskurve nur ein einziges Mal zur Bestimmung des Bandschwerpunkts gelöst werden. Der numerische Aufwand ist nichtsdestotrotz sehr hoch, so dass die Berechnung im Vergleich zu den beiden anderen Methoden deutlich länger dauert. Je nach verwendetem Parametersatz kann es sich dabei durchaus um einen Faktor 4 bis 5 handeln.

Die Ergebnisse der Magnetisierungsberechnung ohne anliegende Spannung sind in Abb.

## 5 Numerische Resultate

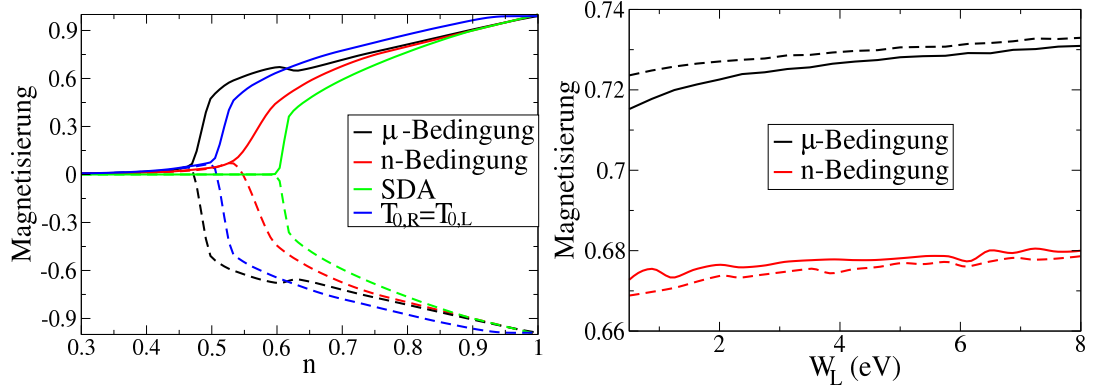


Abbildung 5.38: Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Besetzungszahl in paralleler (durchgezogene Linien) und antiparalleler (gestrichene Linien) Orientierung ohne anliegende Spannung. Für die schwarzen Kurven wurde der rechte Bandschwerpunkt über Gl. (5.12), für die roten Kurven über Gl. (5.13) selbstkonsistent festgelegt. Die grüne Kurve entspricht der Magnetisierung in SDA-Näherung, d.h. im Gleichgewicht. Die blauen Kurven sind zum Vergleich aus Abb. 5.13 übernommen. Rechts: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der linken Bandbreite. Die Farben entsprechen dem linken Bild. Parameter aus Tab. 5.1.

5.38 für beide Berechnungsmethoden des rechten Bandschwerpunkts in Abhängigkeit der Besetzungszahl bzw. der linken Bandbreite dargestellt. Beide Methoden führen offenbar zumindest qualitativ zu ähnlichen Resultaten. Neben den beiden „neuen“ Magnetisierungskurven (schwarz und rot) sind zum Vergleich auch noch die Ergebnisse mit der Annahme des gleichen Bandschwerpunkts  $T_{0,R} = T_{0,L}$  der beiden Ferromagnete und die SDA-Magnetisierung eingezeichnet.

Zunächst soll das linke Bild diskutiert werden. Alle Nichtgleichgewichtskurven zeigen den bereits in Abschnitt 5.6.1 diskutierten Effekt, dass aufgrund der Hybridisierungsabstoßung bereits vor dem eigentlichen Einsetzen der selbstkonsistenten Magnetisierung ein geringer Überschuss an Spin Up-Elektronen vorhanden ist. Die Magnetisierung setzt zuerst mit der  $\mu$ -Bedingung ein, anschließend bei der Annahme gleichen Bandschwerpunkts, dann mit der  $n$ -Bedingung und zuletzt in der SDA. Das frühe Einsetzen der schwarzen und blauen Magnetisierung ist auf einen Teilchenzahleffekt zurückzuführen, da bei beiden Methoden die rechte Besetzungszahl nicht festliegt und daher die tatsächliche rechte Besetzungszahl  $n_R$  größer als das vorgegebene  $n$  ist. Derselbe Effekt ist auch für das Zurückgehen des Magnetisierungsbetrags der schwarzen Kurve oberhalb von  $n = 0.6$  verantwortlich. Dies zeigt einen deutlichen Nachteil der Berechnungsmethode über die chemischen Potentiale: da es sich um eine Gleichgewichtsbedingung handelt, hat man nur wenig Kontrolle über die darauf aufbauende Nichtgleichgewichtsberechnung. Nur bei der roten Kurve ist sichergestellt, dass die rechte Besetzungszahl auch tatsächlich immer (für  $V = 0$ ) dem vorgegebenen  $n_0 = n$  entspricht. Daher stimmt sie



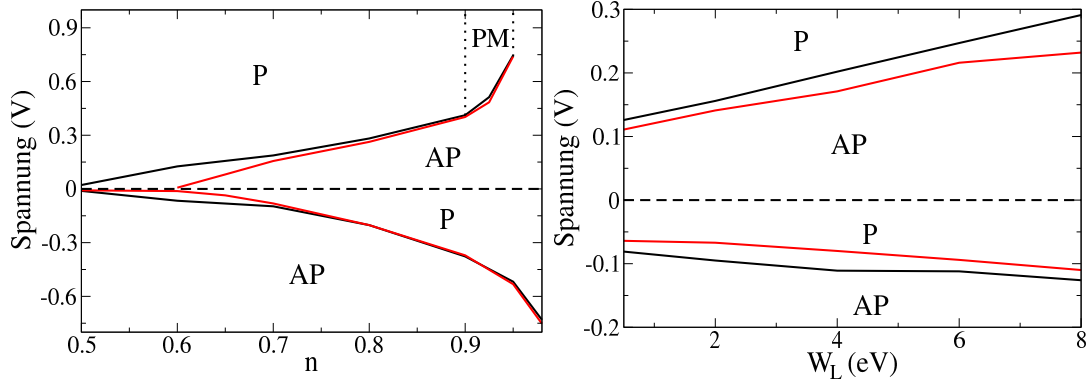


Abbildung 5.39: Abhängigkeit der kritischen Spannung von der Besetzungszahl (linkes Bild) bzw. der linken Bandbreite (rechtes Bild). Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen ausgehend von paralleler Orientierung der Magnetisierungen. Für die schwarze Kurven wurde der rechte Bandschwerpunkt über Gl. (5.12), für die roten Kurve über Gl. (5.13) selbstkonsistent festgelegt. PM steht für Paramagnetismus. Parameter aus Tab. 5.1.

auch am besten mit den Ergebnissen der SDA überein. Allerdings setzt auch hier die Magnetisierung bei geringerer Besetzungszahl ein, wodurch nun eindeutig bewiesen ist, dass der Ferromagnetismus der NSDA stabiler ist als der der SDA. Dies war zu erwarten, da die Kopplung an den linken Ferromagneten stark spinabhängig ist und damit leichter ein Besetzungszahlunterschied zwischen beiden Spinrichtungen geschaffen werden kann. Mit steigendem  $n$  nehmen alle bis auf die bereits erwähnte schwarze Kurve betragsmäßig monoton zu und gehen bei genügend hohen Besetzungszahlen in die Sättigung über.

Die Abhängigkeit der Magnetisierung von der linken Bandbreite  $W_L$  kann anhand des rechten Bilds diskutiert werden.  $W_L$  wurde bewusst gewählt, da sich bei der  $T_{0,R} = T_{0,L}$ -Annahme die rechte Magnetisierung sehr drastisch in Abhängigkeit dieser Bandbreite geändert hat (vgl. Abschnitt 5.6.7 und insbesondere Abb. 5.28). Dieses Verhalten konnte als Besetzungszahleffekt erklärt werden, da das linke chemische Potential mit wachsender Bandbreite zu höheren Energien rutscht und damit die rechte Besetzungszahl erhöht wird. Da der rechte Bandschwerpunkt durch die Bedingungen (5.12) bzw. (5.13) nun aber an das linke Potential bzw. an die vorgegebene Besetzungszahl angepasst wird, kann der Bandbreiteneffekt vom Besetzungszahleffekt getrennt behandelt werden. Und in der Tat bleibt die rechte Magnetisierung für beliebige  $W_L$  stabil. Sie zeigt lediglich einen geringen Anstieg, der aber deutlich schwächer ausfällt als im Fall der  $T_{0,R} = T_{0,L}$ -Annahme. Damit ist gezeigt, dass das drastische Verhalten der Magnetisierung in Abb. 5.28 tatsächlich allein auf der indirekten Änderung der Besetzungszahl beruht.

Das Verhalten der zum Schalten nötigen kritischen Spannung ist in Abb. 5.39 in Abhängigkeit der vorgegebenen Besetzungszahl  $n$  bzw. der linken Bandbreite gezeigt. Die schwarzen Kurven wurden mit Hilfe der  $\mu$ -Bedingung, die roten mit der  $n$ -Bedingung berechnet. In beiden Fällen kommt es zur Umorientierung, d.h. das Schalten war kein

Artefakt der  $(T_{0,R} = T_{0,L} - V)$ -Annahme. Dies war natürlich auch nicht zu erwarten, wird aber von den Ergebnissen explizit bestätigt. Im linken Bild erkennt man, dass die schwarze im Vergleich zur roten Kurve bereits bei niedrigeren Besetzungszahlen Schaltverhalten zeigt, nämlich bei etwa  $n \approx 0.5$  verglichen mit  $n \approx 0.6$ . Dies stimmt mit der Beobachtung überein, dass auch die Magnetisierung mit der  $\mu$ -Bedingung früher einsetzt. Mit steigender Besetzungszahl steigt auch die Magnetisierung an, was zu ebenfalls steigenden kritischen Spannungen führt. Während die antiparallele Orientierung bei Annahme gleicher Bandschwerpunkte sich bereits bei  $n \approx 0.85$  stabilisiert (vgl. Abb. 5.13), wird sie bei den selbstkonsistenten Bandschwerpunkten erst oberhalb von  $n = 0.95$  stabil. Allerdings zeigt sich zwischen  $n = 0.9$  und  $n = 0.95$  oberhalb einer kritischen Spannung ein Übergang von antiparalleler Ausrichtung zum Paramagnetismus. Das Auftreten dieser paramagnetischen Phase liegt daran, dass das System zwar schalten „möchte“, die Abstoßung aber nicht ausreicht, um dies vollständig zu erreichen. Es kommt lediglich zu einer deutlichen Abnahme der Magnetisierung (vgl. beispielsweise die antiparallele  $\epsilon_{RP} = 0.1$  eV-Kurve im linken Bild von Abb. 5.24, die ein ähnliches Verhalten zeigt). Sobald das System sich aber in der Nähe des paramagnetischen Zustands  $m_R = 0$  befindet, wird es diesen ohne Zwang auch nicht wieder von selbst verlassen. Dadurch kommt das beobachtete Verhalten zustande.

Im Gegensatz zu Abb. 5.13, wo dies nur bis  $n = 0.95$  der Fall war, zeigt die parallele Orientierung auch für noch höhere Besetzungszahlen Schaltverhalten. Die Erklärung für diesen Unterschied liefert die Magnetisierungskurve im linken Bild von Abb. 5.38. Die blaue  $(T_{0,R} = T_{0,L} - V)$ -Magnetisierung ist bei hohen Besetzungszahlen durchgehend betragsmäßig größer als die anderen. Insbesondere ist sie bereits ab etwa  $n = 0.95$  mit  $m_R = n_R = 1$  gesättigt. Die unteren Hubbard-Bänder sind somit vollständig besetzt. Dadurch kann kein Strom mehr fließen, wodurch Schalten unmöglich wird. Die Magnetisierung mit  $\mu$ - bzw.  $n$ -Bedingung ist dagegen für  $n < 1$  immer echt kleiner als 1, d.h. die unteren Bänder sind noch nicht vollständig besetzt. Daher ist ein endlicher Stromfluss prinzipiell möglich.

Das rechte Phasendiagramm in Abhängigkeit der Bandbreite  $W_L$  ist sehr einfach zu verstehen. Da die Magnetisierung für beide Ausrichtungen und alle  $W_L$  stabil ist, kommt es durchgehend zum Schalten. Die kritischen Spannungen nehmen dabei analog zum Verhalten der Magnetisierung mit steigender Bandbreite zu. Die der schwarzen Kurve, also der  $\mu$ -Bedingung, liegen durchgehend betragsmäßig über denen der  $n$ -Bedingung. Auch hier spiegelt sich lediglich das Verhalten der entsprechenden Magnetisierungen wider. Somit ist auch die Erklärung des Abbrechens des Schaltverhaltens bei großen Bandbreiten im Phasendiagramm in Abb. 5.13 als Besetzungszahleffekt bestätigt. Die Erhöhung der Bandbreite an sich führt nicht zum Abbruch des Schaltens.

Das Fazit dieses Abschnitts ist, dass alle drei Annahmen bezüglich des rechten Bandschwerpunkts im Rahmen des Modells verwendet werden können. Welche man verwendet, sollte bei der Beschreibung eines konkreten Experiments letztlich von den vorliegenden Informationen abhängen, je nachdem ob der Bandschwerpunkt selbst, das chemische Potential oder die Besetzungszahl bekannt sind bzw. gemessen wurden. In den folgenden Abschnitten wird weiterhin die Annahme  $T_{0,R} = T_{0,L} - V$  benutzt, da sie am einfachsten zu handhaben ist.

## 5.8 Mean Field-Näherung für beide Ferromagnete

In den letzten Abschnitten wurde gezeigt, dass es mit Hilfe des vorgeschlagenen Modells und der NSDA-Näherung möglich ist, strominduziertes Schalten zu modellieren. Dabei stellt sich natürlich die Frage, ob dies auch mit anderen Näherungen für das Hubbard-Modell möglich wäre oder ob es sich unter Umständen lediglich um eine Eigenart der NSDA handelt. Um diese Frage zu beantworten, wird der rechte Ferromagnet in diesem Abschnitt, genau wie der linke, im Rahmen einer Mean Field-Näherung beschrieben. Die rechte Wechselwirkungsselbstenergie lautet also

$$\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) = U_R \langle n_{R,-\sigma} \rangle. \quad (5.14)$$

Da es sich um eine reelle Größe handelt, verschwindet ihre kleinere Komponente, d.h.  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) = 0$  (vgl. Abschnitt 4.1). Alle Parameter werden wiederum wie in Tabelle 5.1 gewählt, um die Ergebnisse besser vergleichen zu können. Aufgrund der Form der Selbstenergie ist davon auszugehen, dass  $U_R$  und die vorgegebene Besetzungszahl  $n$  die interessantesten Parameter sind, um die NSDA- mit der Mean Field-Näherung zu vergleichen. In Abb. 5.40 ist zunächst das Magnetisierungsverhalten ohne anliegende Spannung dargestellt, um die relevanten Parameterbereiche zu identifizieren. Im linken Bild ist die Abhängigkeit von der rechten Wechselwirkungsstärke  $U_R$  gezeigt. Die antiparallele Magnetisierung zeigt das typische Mean Field-Verhalten: sie ist erst ab einem bestimmten kritischen  $U_R \approx 0.27$  eV stabil, sinkt anschließend zuerst schnell, dann etwas langsamer und geht bei  $U_R \approx 1.65$  eV in ihren Sättigungswert über. Die parallele Magnetisierung verhält sich im großen ganzen genauso, außer zwischen  $U_R = 0.27$  eV und  $U_R = 0.45$  eV, da sie dort nicht stabil ist und das System unabhängig vom Startwert eine negative Magnetisierung aufweist. Der Grund hierfür ist die Abstoßung aufgrund der Hybridisierung. In diesem Bereich ist der rechte Ferromagnet nicht gesättigt, d.h. beide Spinrichtungen haben eine endliche Besetzungszahl  $\langle n_{R,\uparrow} \rangle, \langle n_{R,\downarrow} \rangle \neq 0$ . Dies führt aufgrund der Mean Field-Selbstenergie dazu, dass die Bandschwerpunkte beider Bänder oberhalb des freien Bandschwerpunkts  $T_{0,R}$  liegen, der mit dem linken Bandschwerpunkt identisch ist. Durch die Abstoßung mit dem linken Band wird das Spin Up-Band zu noch höheren Energien geschoben, während das Spin Down-Band nicht unmittelbar beeinflusst wird. Diese Abstoßung ist nicht sehr groß, aber für kleine  $U_R$  ist auch der Unterschied der beiden Bandschwerpunkte  $T_{0,R} + U_R \langle n_{R,\uparrow} \rangle$  und  $T_{0,R} + U_R \langle n_{R,\downarrow} \rangle$  entsprechend gering, wodurch die Abstoßung ausreicht, um sie aneinander vorbei zu schieben. Es stellt sich also eine negative Magnetisierung ein! Für höhere  $U_R$  wird der Abstand der Spinbänder im rechten Ferromagneten aber immer größer, so dass der Abstoßungseffekt nicht mehr ausreicht um die Bänder zu vertauschen. Positive Magnetisierung wird somit möglich.

Das rechte Bild zeigt die Magnetisierungskurven des rechten Ferromagneten als Funktion der Besetzungszahl. Offenbar stimmen sie für beide Orientierungen praktisch überein, und zeigen ein monoton wachsendes Verhalten mit steigender Besetzungszahl. Oberhalb von  $n \approx 0.15$  sind beide Phasen stabil, darunter verschwindet die Magnetisierung. Ausgehend von den Beobachtungen der  $U_R$ -Magnetisierungskurven, sollte auch in diesem Fall die parallele Magnetisierung für kleine Besetzungszahlen instabil sein. Dies ist al-

## 5 Numerische Resultate

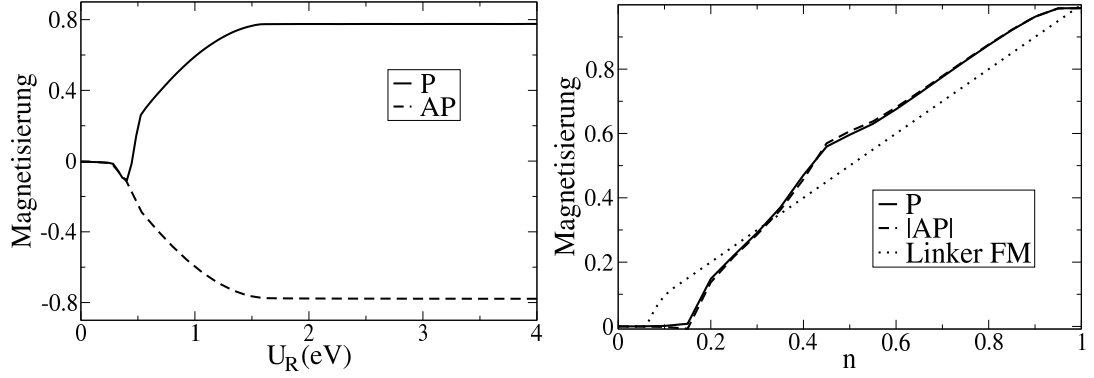


Abbildung 5.40: Magnetisierung des rechten Ferromagneten in Mean Field-Näherung in Abhängigkeit der rechten Wechselwirkungsstärke  $U_R$  (linkes Bild) bzw. der Besetzungszahl  $n$  (rechtes Bild) für beide Orientierungen ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist im rechten Bild der Betrag der antiparallelen Magnetisierung und zusätzlich noch die Magnetisierung des linken Ferromagneten eingezeichnet. Parameter aus Tab. 5.1.

lerdings nicht der Fall. Die Magnetisierung war bei einer vorgegebenen Besetzungszahl von  $n = 0.7$  zwischen  $U_R \approx 0.3 - 0.45$  eV instabil, das entspricht einer effektiven Wechselwirkungsstärke von  $U_R n \approx 0.21 - 0.32$  eV. Im rechten Bild ist  $U_R = 4$  eV vorgegeben. Um also dieselbe effektive Wechselwirkungsstärke zu erreichen, wären Besetzungszahlen zwischen  $n \approx 0.05$  und  $n \approx 0.08$  nötig. In diesem Bereich ist der linke Ferromagnet allerdings noch gar nicht magnetisch, daher ist in diesem Fall unabhängig vom Startwert allein die paramagnetische Lösung stabil. Für höhere Besetzungszahlen ist wiederum der Abstand zwischen den Spinbändern zu groß, so dass beide Phasen stabil bleiben.

Für die Diskussion des Schaltverhaltens sind also vor allem die Bereiche oberhalb von  $U_R \approx 0.45$  eV und  $n \approx 0.15$  interessant. In Abb. 5.41 sind die Phasendiagramme dargestellt. Anhand der Erklärung, die in Abschnitt 5.4 für das Auftreten des Hystereseverhaltens geliefert wurde, ist es nur für relativ kleine Werte der Coulomb-Abstoßung  $U_R$  zu erwarten. Relativ klein bedeutet hierbei, dass der rechte Ferromagnet noch keine Sättigung zeigt, d.h. dass die beiden Spinbänder noch deutlich überlappen. Für höhere  $U_R$  entsteht dagegen eine Bandlücke zwischen Majoritäts- und Minoritätsband, die deutlich größer ist als die Abstoßung aufgrund der Hybridisierung. Daher kann in diesem Bereich kein Schalten stattfinden. Diese Vermutung wird von dem linken Phasendiagramm in Abb. 5.41 bestätigt. Unterhalb von  $U_R \approx 0.45$  eV liegt ohne Spannung keine spontane Magnetisierung vor. Somit ergibt sich durch den Zu- bzw. Abfluss von Spin Up-Elektronen für positive Spannungen eine positive, für negative Spannungen eine negative Magnetisierung, wie es auch für die NSDA beobachtet wurde. Zwischen  $U_R \approx 0.5$  eV und  $U_R \approx 1.75$  eV tritt Hystereseverhalten auf. Oberhalb von  $U_R = 1.75$  eV bleibt die parallele Orientierung allerdings für beliebig hohe negative Spannungen stabil. Nur die antiparallele Orientierung kann nach wie vor durch eine positive Spannung umorientiert werden. Das dazu nötige kritische  $V$  wächst ungefähr linear mit  $U_R$ . Dies ist, wie bereits

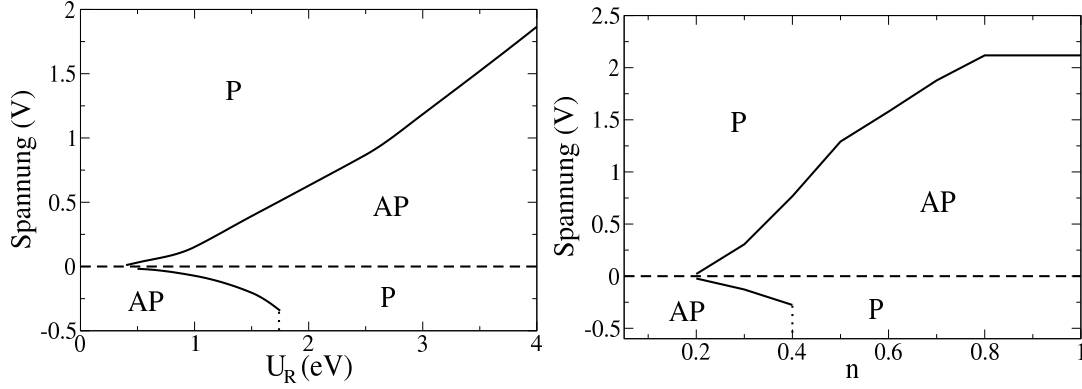


Abbildung 5.41: Abhängigkeit der kritischen Spannung von der rechten Wechselwirkungsstärke  $U_R$  (links) bzw. der Besetzungszahl  $n$  (rechts) mit Mean Field-Näherung für beide Ferromagnete. Positive Spannungen gelten jeweils ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1.

das Zurückschalten der antiparallelen Orientierung bei niedrigen  $U_L$  in der NSDA (vgl. Abschnitt 5.6.2), eine Folge des Stromflusses. Durch Anlegen einer positiven Spannung an den antiparallel ausgerichteten rechten Ferromagneten wird er zu tieferen Energien geschoben. Da in diesem Fall das Spin Up- über dem Spin Down-Band liegt, führt dies dazu, dass die rechten und linken Spin Up-Bänder auf eine Höhe rutschen. Da das rechte Spin Up-Band größtenteils unbesetzt ist, kommt es zum Stromfluss, d.h. es werden zusätzliche Spin Up-Elektronen in den rechten Ferromagneten tunneln. Durch die Selbstkonsistenz wird dieser Effekt noch verstärkt: aufgrund der höheren Spin Up-Besetzung rutscht das Spin Down-Band, das ja mit  $U_R \langle n_{R,\uparrow} \rangle$  verschoben wird, ebenfalls zu höheren Energien, wodurch die Spin Down-Besetzungszahl reduziert wird. Dies wiederum verschiebt das Spin Up-Band zu tieferen Energien, womit  $\langle n_{R,\uparrow} \rangle$  weiter erhöht wird usw. Durch diesen Effekt kommt es letztlich zur Umorientierung des Ferromagneten. Da die Hybridisierungsabstoßung hierbei keine Rolle spielt, ist auch der Abstand zwischen den Spinbändern nicht entscheidend. Daher schaltet der Ferromagnet auch bei hohen  $U_R$ . Das eigentliche strominduzierte Schalten, d.h. die volle Hysteresekurve, tritt allerdings nur bei kleinen bis mittleren  $U_R$  auf. Dies steht im Gegensatz zur NSDA, die bei allen  $U_R$  oberhalb der kritischen Wechselwirkungsstärke, ab der eine spontane Magnetisierung möglich ist, Schaltverhalten vorhersagt (vgl. Abb. 5.19).

Auch das Phasendiagramm in Abhängigkeit der Bandbesetzung im rechten Bild von Abb. 5.41 zeigt ein ähnliches Verhalten. Für zu geringe Bandbesetzungen, bei denen noch kein selbstkonsistenter Magnetismus im rechten Ferromagnet existiert, wird das Auftreten der Phasen allein durch die Richtung des Stroms bestimmt. Das System orientiert sich also parallel für positive Spannungen und antiparallel für negative Spannungen. Ab etwa  $n = 0.2$  wird die rechte Magnetisierung auch bei  $V = 0$  endlich und das System zeigt Schaltverhalten, wobei die kritische Spannung, die zur Umorientierung nötig ist mit steigender Besetzungszahl ebenfalls zunimmt. Bereits bei  $n = 0.4$  stabilisiert sich die par-

alle Phase allerdings, so dass, wie im Fall großer  $U_R$ , keine vollständige Hysteresekurve mehr vorliegt. Die Begründung dafür ist erneut, dass die effektive Wechselwirkungsstärke  $U_R n$ , und damit der Abstand der beiden Spinbänder, im Vergleich zum Abstoßungseffekt der Hybridisierung zu groß wird, so dass es nicht mehr zur Umorientierung kommen kann. Die antiparallele Phase kann aber weiterhin für alle Besetzungszahlen geschaltet werden, was ebenso wie bei dem  $U_R$ -Phasendiagramm verstanden werden kann, da es, sobald das Spin Up-Band des rechten Ferromagneten energetisch auf derselben Höhe wie das linke Spin Up-Band liegt, zum Zufluss von Spin Up-Elektronen und somit zur Reduzierung der negativen Magnetisierung kommt.

Es wurden in diesem Abschnitt somit zwei wesentliche Ergebnisse gewonnen. Zum einen ist strominduziertes Schalten auch möglich, wenn beide Ferromagnete in Mean Field-Näherung beschrieben werden. Es handelt sich also insbesondere nicht um ein Artefakt der NSDA, sondern um einen intrinsischen Effekt des Systems. Da alle bisherigen Theorien, basierend auf der Landau-Lifshitz-Gleichung, die Wechselwirkung auf Mean Field-Niveau behandelt haben, ist dieses Ergebnis wichtig für die Glaubwürdigkeit des Modells. Zum anderen tritt das Schaltverhalten in Mean Field aber nur bei schwacher bis mittlerer effektiver Wechselwirkungsstärke  $U_R n \lesssim 1.2$  auf. Im Gegensatz dazu ist die NSDA auch bei stark korrelierten Systemen, wie sie im Experiment verwendet werden, in der Lage den Schaltvorgang zu modellieren.

## 5.9 Spektraldichteansatz für beide Ferromagnete

Bisher wurde der linke Ferromagnet durchgehend im Rahmen einer Mean Field-Näherung behandelt. Darüberhinaus wurde seine Wechselwirkungsstärke  $U_L$  üblicherweise sehr groß gewählt. Dadurch wurde er zum Halbmetall, d.h. es lagen nur Elektronen einer Spinrichtung an seiner Fermienergie vor. Er war also vollständig polarisiert und daher waren nur Spin Up-Zustände vorhanden, die am Transportprozess teilnehmen konnten. Zwar existieren solche Halbmetalle auch in der Natur [132, 133, 134], andererseits werden, bis auf wenige Ausnahmen [135, 128, 136], die meisten Experimente mit Ferromagneten durchgeführt, bei denen Elektronen beider Spinrichtungen an der Fermienergie vorhanden sind. Daher soll in diesem Abschnitt der Versuch unternommen werden, das vorliegende Modell auch auf solche Fälle zu erweitern. Dazu wird der linke Ferromagnet von nun an mit der (Gleichgewichts-)SDA beschrieben, d.h. seine Selbstenergie lautet

$$\Sigma_{\mathbf{k}_L\sigma}^r(E) = U_L \langle n_{L,-\sigma} \rangle \frac{E - T_{0,L} - B_{L,-\sigma}}{E - T_{0,L} - B_{L,-\sigma} - U_L(1 - \langle n_{L,-\sigma} \rangle)} \quad (5.15)$$

mit der spinabhängigen Bandverschiebung

$$\begin{aligned} \langle n_{L,-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{L,-\sigma} \rangle) B_{L,-\sigma} = & -\frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k}_L} (\epsilon_{\mathbf{k}_L} - T_{0,L}) \int_{-\infty}^{\infty} dE f_L(E) \times \\ & \times \left( \frac{2}{U_L} (E - \epsilon_{\mathbf{k}_L}) - 1 \right) \text{Im}(g_{\mathbf{k}_L\sigma}^r(E)) \end{aligned} \quad (5.16)$$

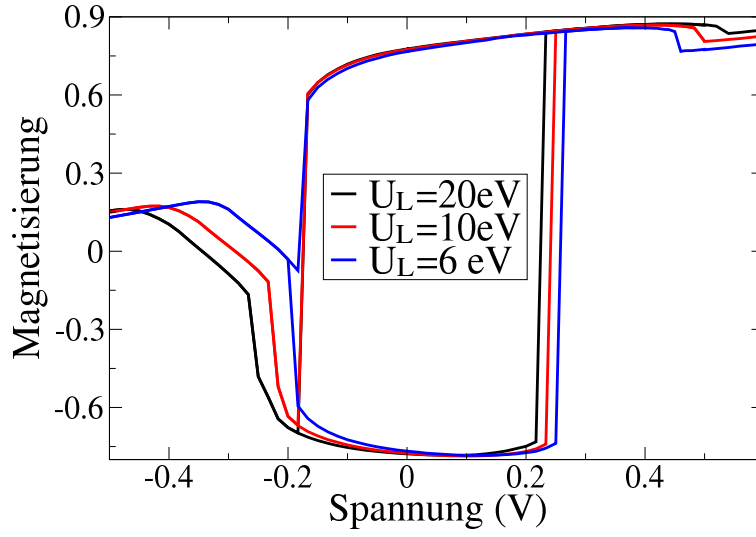


Abbildung 5.42: Magnetisierung des rechten Ferromagneten für verschiedene Stärken der linken Coulomb-Abstoßung  $U_L$ . Der linke Ferromagnet wird in SDA-, der rechte in NSDA-Näherung beschrieben. Parameter aus Tab. 5.1.

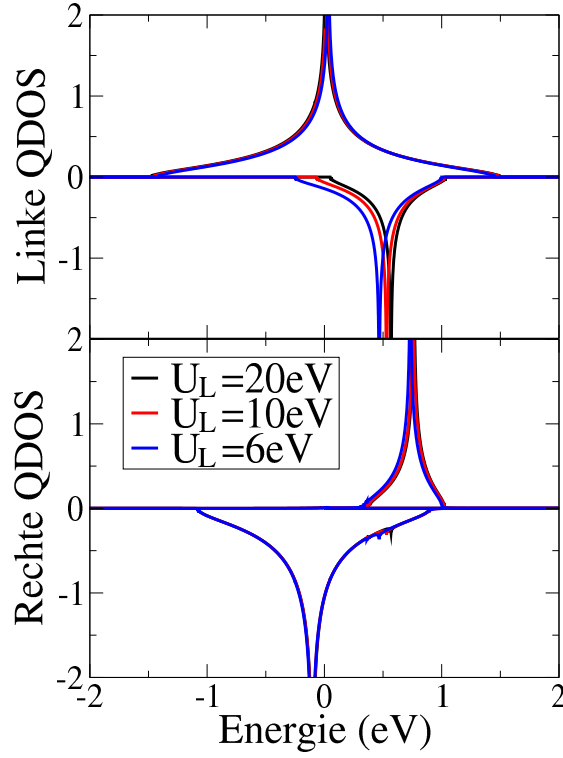


Abbildung 5.43: Quasiteilchenzustandsdichten der beiden Ferromagnete im SDA-NSDA-System für antiparallele Orientierung und  $V = 0$ . Es sind lediglich die unteren Hubbard-Bänder dargestellt. Parameter aus Tab. 5.1.

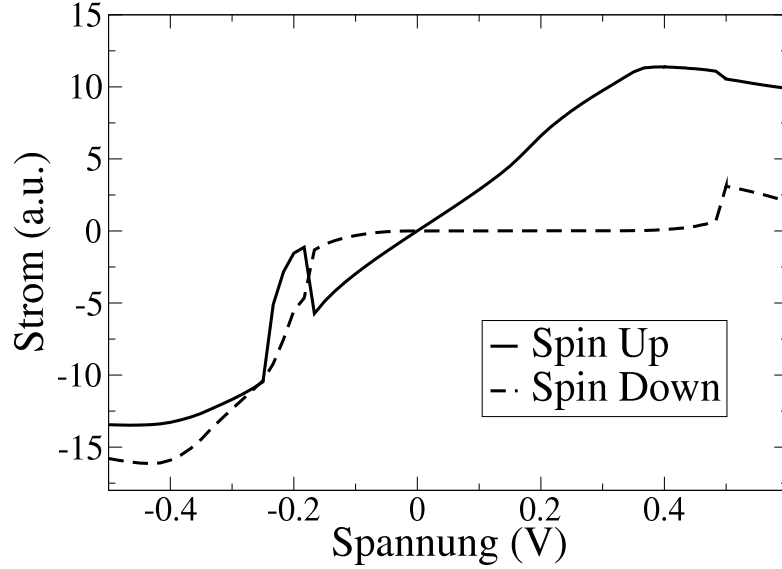


Abbildung 5.44: Tunnelstrom in Abhängigkeit der Spannung für beide Spinrichtungen und  $U_L = 10$  eV ausgehend von paralleler Orientierung der beiden Magnetisierungen. Der linke Ferromagnet wird in SDA-, der rechte in NSDA-Näherung behandelt. Die restlichen Parameter wurden aus Tab. 5.1 übernommen.

und der Greenfunktion

$$g_{\mathbf{k}_L\sigma}^r(E) = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_L} - \Sigma_{\mathbf{k}_L\sigma}^r(E)}. \quad (5.17)$$

Der rechte Ferromagnet wird weiterhin in NSDA-Näherung behandelt. In Abb. 5.42 ist die spannungsabhängige Magnetisierung des rechten Ferromagneten für verschiedene Werte der linken Coulomb-Wechselwirkungsstärke  $U_L$  dargestellt. Man erkennt, dass auch in diesem Fall die Magnetisierung prinzipiell Schaltverhalten zeigt. Allerdings treten in beiden Spannungsrichtungen zusätzliche Effekte auf. Bei negativen Spannungen geht die antiparallele Orientierung in diesem Fall unterhalb einer kritischen Spannung in parallele Ausrichtung über. Dasselbe Verhalten wurde auch im Mean Field-NSDA-System für kleine  $U_L$  beobachtet (vgl. Abschnitt 5.6.2). Obwohl der Effekt dort bereits begründet wurde, soll er anhand der Quasiteilchenzustandsdichten in Abb. 5.43 und der spinabhängigen Stromkurven in Abb. 5.44 noch etwas detaillierter untersucht werden. Gezeigt sind die unteren Hubbard-Bänder der beiden Ferromagnete in antiparalleler Ausrichtung ohne anliegende Spannung. Durch eine Änderung von  $U_L$  wird der rechte Ferromagnet offenbar nur wenig beeinflusst. Das linke Spin Down-Band schiebt sich mit sinkendem  $U_L$  aber erkennbar zu niedrigeren Energien. Durch Anlegen einer negativen Spannung wird die rechte QDOS im Vergleich zur linken zu höheren Energien, in diesem Bild also nach rechts, geschoben. Dadurch rutschen die beiden Spin Down-Bänder auf



eine Höhe und dies führt entsprechend zu einem endlichen Spin Down-Strom, wie in Abb. 5.44 zu erkennen ist. Insbesondere wird die Situation eintreten, dass die Maxima der beiden Spin Down-Bänder sich genau gegenüberliegen. Dadurch entsteht ein entsprechend hoher Spin Down-Strom. Dieser ist unterhalb von  $V \approx -0.2$  stärker als der Spin Up-Strom. Es fließen also mehr Spin Down- als Spin Up-Elektronen ab, wodurch die (negative) Magnetisierung geschwächt wird. Ganz analog zu dem umgekehrten Schalten von parallel zu antiparallel kann damit verstanden werden, wieso es zum Zurückschalten kommt.

Für positive Spannungen ändert sich das Verhalten im Vergleich zu den bisherigen Hysteresekurven ebenfalls. Oberhalb einer bestimmten Spannung nehmen die Magnetisierungen nämlich um einen relativ geringen, aber deutlich erkennbaren Betrag ab. Mit sinkendem  $U_L$  wird diese Abnahme stärker und erfolgt früher. Auch in diesem Fall ist das Spin Down-Band im linken Ferromagneten verantwortlich. Bei etwa  $V \approx 0.5$  liegt es nämlich energetisch dem rechten Spin Down-Band gegenüber. Dadurch kommt es zu einem Anstieg des Spin Down-Stroms (vgl. Abb. 5.44). Bei kleinerem  $U_L$  rutscht das linke Spin Down-Band zu niedrigeren Energien, daher liegen die beiden Bänder bereits bei niedrigeren Spannungen auf einer Höhe. Außerdem ist in diesen Fällen das spektrale Gewicht des Bands größer, wodurch auch der Tunnelstrom höher sein wird. Daher nimmt die Magnetisierung stärker ab. Offenbar bleibt der Spin Down-Strom aber selbst bei kleinen  $U_L$  deutlich geringer als der Spin Up-Strom, da er lediglich von den beiden Minoritätsbändern und nicht, wie im Fall antiparalleler Ausrichtung, vom Majoritätsband verursacht wird. Daher fließen nach wie vor mehr Spin Up- als Spin Down-Elektronen zu und somit bleibt die positive Magnetisierung trotz der Abnahme stabil, d.h. es kommt nicht zum Zurückschalten, wie im Fall negativer Spannungen und antiparalleler Orientierung.

Würde man die Hybridisierungsstärke senken, würde das im Experiment nicht beobachtete Zurückschalten zwar wieder verschwinden, aber dann bleibt auch das restliche Schaltverhalten aus. Es wird im SDA-NSDA-System also nicht gelingen, eine „normale“ Hysteresekurve zu modellieren. Ursache hierfür ist letztlich, dass die Minoritätsbänder so schmal und hoch sind. Wären sie breiter und weniger hoch, wäre auch der Spin Down-Strom geringer. Dann würde es zwar immer noch zu einer Reduzierung des Betrags der Magnetisierung, aber nicht mehr notwendigerweise zum Zurückschalten kommen. Tatsächlich führen höhere Theorien, die über die SDA hinausgehen und Quasiteilchendämpfungseffekte berücksichtigen, genau zu einem solchen „Verschmieren“ des Minoritätsbands [137, 138, 139]. Das Fazit ist somit, dass die SDA bzw. NSDA (vermutlich) aufgrund der Vernachlässigung der Quasiteilchendämpfung nicht ausreichen, um das experimentell beobachtete Schaltverhalten bei nicht komplett polarisierten Ferromagneten vollständig zu erklären. Dazu wird eine verbesserte Theorie benötigt, deren Selbstenergie einen endlichen Imaginärteil aufweist.

## 5.10 Nichterhaltung der Wellenzahl beim Zurücktunneln

In Abschnitt 3.5.3 wurde das Modell ohne die Annahme der Wellenzahlerhaltung beim Zurücktunneln („Diagonalannahme“), die allen bisherigen numerischen Ergebnissen in diesem Kapitel zu Grunde lag, exakt gelöst. Es soll nun untersucht werden, welche Unterschiede es zwischen beiden Berechnungsweisen gibt. Am besten eignet sich dazu die Abhängigkeit der Magnetisierung von der Hybridisierungsstärke  $\epsilon_{MI}$ . Es wurde bereits begründet, dass die effektive Tunnelselbstenergie  $\hat{\Delta}_{\mathbf{k}_R\sigma}$  (3.112) für kleine  $\epsilon_{MI}$  in die normale Tunnelselbstenergie  $\Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}$  übergeht. Es sind also nur für genügend große  $\epsilon_{MI}$  Unterschiede zwischen beiden Methoden zu erwarten. Zur Überprüfung dieser These sind im linken Bild von Abb. 5.45 die Mean Field-Magnetisierungskurven des rechten Ferromagneten ohne anliegende Spannung als Funktion der Hybridisierungsstärke gezeigt. Dabei wurde die Mean Field-Näherung verwendet, da die Diagonalannahme bei der Herleitung der NSDA benutzt wurde. Diese eignet sich daher nicht zum Vergleich der Ergebnisse. Die schwarzen Kurven sind die exakt berechneten, für die roten wurde die Diagonalannahme verwendet. Offenbar wird die These von den numerischen Ergebnissen bestätigt. Erst oberhalb von etwa  $\epsilon_{MI} = 0.3$  eV sind überhaupt Unterschiede zwischen den beiden Methoden zu erkennen. Diese liegen allerdings selbst für größere Hybridisierungsstärken lediglich im Prozentbereich, sind also praktisch vernachlässigbar. Nur für große  $\epsilon_{MI} > 0.6$  eV kommt es zu deutlich ausgeprägten Differenzen zwischen beiden Versionen. Es wurde aber bereits an anderer Stelle begründet, dass diese Werte wegen der Einschränkung  $\epsilon_{MI}^4 \stackrel{!}{<} |t_R|$  nicht mehr im physikalisch glaubwürdigen Parameterbereich liegen (vgl. Abschnitt 5.6.4).

Neben der  $V = 0$ -Magnetisierung ist natürlich vor allem das Schaltverhalten von Interesse. Im rechten Bild der Abb. 5.45 sind die spannungsabhängigen Magnetisierungskurven für zwei verschiedene Werte der Hybridisierung  $\epsilon_{MI}$  gezeigt. Die durchgezogenen Linien wurden ohne Wellenzahlerhaltung, die gestrichenen im Rahmen der Diagonalannahme berechnet. Für  $\epsilon_{MI} = 0.5$  eV (schwarze Kurven) ist praktisch kein Unterschied zwischen beiden Versionen feststellbar. Insbesondere stimmen die kritischen Spannungen, bei denen die Magnetisierung ihr Vorzeichen umgekehrt, vollkommen überein. Erst bei der hohen Hybridisierungsstärke von  $\epsilon_{MI} = 0.8$  eV sind Unterschiede zu erkennen. Ohne Wellenzahlerhaltung schaltet das System bei etwas niedrigeren Spannungswerten und auch insgesamt ist der Betrag der Magnetisierung niedriger. Dies stimmt mit den Erkenntnissen aus dem linken Bild überein, wo zu erkennen ist, dass die Magnetisierungen ohne Wellenzahlerhaltung für große  $\epsilon_{MI}$  deutlich unter den entsprechenden Magnetisierungen mit Diagonalannahme liegen.

Damit konnte gezeigt werden, dass die Diagonalannahme über einen weiten Parameterbereich sehr gut mit der exakten Lösung übereinstimmt. In der Tat ist es auf den ersten Blick erstaunlich, wie gut diese Übereinstimmung ist, da sich die Ausdrücke für die kleineren Greenfunktionen doch deutlich unterscheiden. Dieser Aspekt soll noch etwas näher untersucht werden, da sich daraus auch physikalische Konsequenzen ergeben. Zur numerischen Auswertung der exakten Lösung wurde folgender Ausdruck für die kleinere

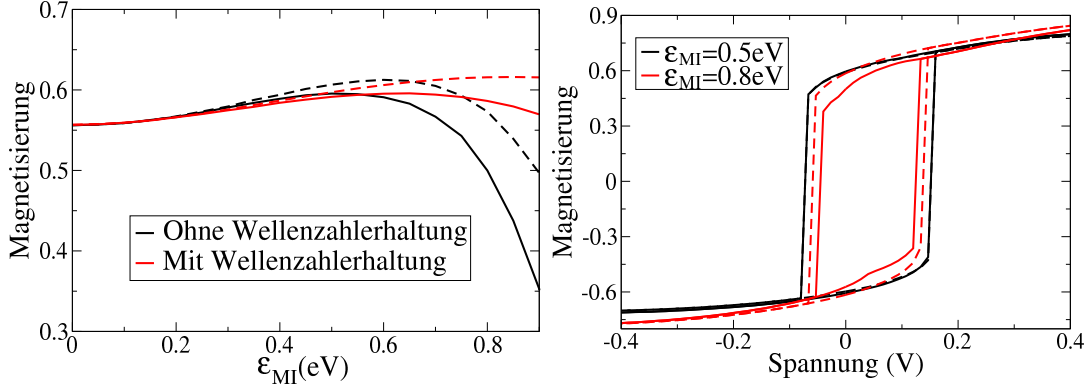


Abbildung 5.45: Links: Mean Field-Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Hybridisierungsstärke  $\epsilon_{MI}$  ohne anliegende Spannung. Die schwarzen Kurven wurden ohne, die roten Kurven mit Diagonalannahme berechnet. Durchgezogene Linien stehen für parallele, gestrichelte Linien für antiparallele Ausrichtung der Magnetisierungen. Rechts: Spannungsabhängige Magnetisierungskurven des rechten Ferromagneten für zwei verschiedene Hybridisierungsstärken  $\epsilon_{MI}$ . Die durchgezogenen Linien wurden in diesem Fall ohne, die gestrichelten mit der Diagonalannahme berechnet. Parameter aus Tab. 5.1.

Greenfunktion verwendet:

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}^< = \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^< \left| \frac{F_{\mathbf{k}_R\sigma}^r}{1 - F_{R\sigma}^r \Delta_{R\sigma}^r} \right|^2$$

$$\stackrel{(3.104)}{=} \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^< \left| \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r - (F_{\mathbf{k}_R\sigma}^r)^{-1} F_{R\sigma}^r \Delta_{R\sigma}^r} \right|^2 \quad (5.18)$$

Er ist äquivalent zum ursprünglichen Ausdruck (3.113), wie durch einige Umformungen gezeigt werden kann (vgl. Anhang .8). Vergleicht man dies mit der kleineren Greenfunktion mit Diagonalannahme,

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}^< = \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^< \left| \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r - \Delta_{R\sigma}^r} \right|^2 \quad (5.19)$$

erkennt man sofort, dass der Term

$$(F_{\mathbf{k}_R\sigma}^r)^{-1} F_{R\sigma}^r = \sum_{\mathbf{q}_R} \frac{E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r}{E - \epsilon_{\mathbf{q}_R} - \Sigma_{\mathbf{q}_R\sigma}^r} \quad (5.20)$$

den wesentlichen Unterschied zwischen beiden Ausdrücken darstellt, da er mit Diagonalannahme konstant gleich 1 ist. Die größten Beiträge zur kleineren Greenfunktion liefern die Pole der Greenfunktion, für die bei nicht zu großen Hybridisierungen näherungsweise

$$E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^r \xrightarrow{\epsilon_{MI} \ll 1} 0 \quad (5.21)$$

gilt. Bei diesen Energien gilt für den obigen Term:

$$\sum_{\mathbf{q}_R} \frac{E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}}{E - \epsilon_{\mathbf{q}_R} - \Sigma_{\mathbf{q}_R\sigma}} = 1 + \sum_{\mathbf{q}_R \neq \mathbf{k}_R} \frac{E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}}{E - \epsilon_{\mathbf{q}_R} - \Sigma_{\mathbf{q}_R\sigma}} \xrightarrow{E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma} \rightarrow 0} 1 \quad (5.22)$$

Somit stimmen beide Ausdrücke für die kleineren Greenfunktionen an diesen wesentlichen Stellen ungefähr überein. Obwohl in der exakten Lösung, ausgehend von einem Zustand mit Wellenzahl  $\mathbf{k}_R$ , beim Tunneln also prinzipiell Übergänge in Zustände mit beliebiger Wellenzahl  $\mathbf{q}_R$  erlaubt sind, werden in der Praxis nur solche mit Wellenzahl  $\mathbf{q}_R \approx \mathbf{k}_R$  größere Beiträge liefern, da alle anderen stark unterdrückt sind. Damit ist erneut bestätigt, dass die Diagonalannahme, die ja ursprünglich lediglich zur mathematischen Vereinfachung des Problems eingeführt wurde, auch physikalisch glaubwürdig ist. Außerdem lässt sich damit die Verringerung der kritischen Spannung erklären, die für große  $\epsilon_{MI}$  beobachtet wurde. Ohne die Diagonalannahme stehen den Elektronen nämlich mehr Transportkanäle zur Verfügung, da sie in Zustände mit beliebiger Wellenzahl tunneln dürfen. Dadurch wird der Tunnelstrom erhöht, wodurch bereits eine geringere Spannung ausreicht, um die Magnetisierung umzuorientieren. Dies macht sich wegen der diskutierten Unterdrückung des Tunnelns zwischen Zuständen mit verschiedener Wellenzahl allerdings erst bei sehr hohen Hybridisierungsstärken bemerkbar.

## 6 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde ein theoretisches Modell vorgestellt, mit dem es möglich ist, strominduziertes Schalten der Magnetisierung in magnetischen Tunnelstrukturen auf selbstkonsistente Art zu beschreiben. Im Gegensatz zu bereits existierenden Theorien handelt es sich um ein rein mikroskopisches Modell, d.h. es mussten keine Annahmen über das makroskopische Verhalten des Systems gemacht werden. Die beiden Ferromagnete, aus denen die Tunnelstruktur besteht, wurden durch das Hubbard-Modell beschrieben, das allgemein als guter Ausgangspunkt zur Modellierung von Bandferromagneten angesehen wird. Der Isolator, der die Ferromagnete voneinander trennt, sowie der Paramagnet, der als Elektronenreservoir dient, wurden als wechselwirkungsfrei angenommen. Die Kopplung zwischen den vier Regionen wurde durch eine Hybridisierung zwischen den Bändern modelliert. Die wesentlichen Größen zur Diskussion des Schaltens sind die Magnetisierung des freien Ferromagneten und der Tunnelstrom durch das gesamte System. Ihre Bestimmungsgleichungen konnten im Rahmen des Keldysh-Formalismus abgeleitet werden. Dabei mussten keine Annahmen bezüglich der Beschreibung der Wechselwirkung gemacht werden. Die Theorie ist in dieser Hinsicht also allgemeingültig und kann für beliebige Wechselwirkungsselbstenergien verwendet werden.

Da es sich beim Hubbard-Modell um ein nicht exakt lösbares Vielteilchenproblem handelt, musste eine physikalisch möglichst glaubhafte Näherung zu seiner Lösung gefunden werden. Es ist gelungen, den aus dem Gleichgewicht bekannten Spektraldichteansatz (SDA) auf einen Nichtgleichgewichtsspektraldichteansatz (NSDA) zu erweitern. Die Grundidee seiner Herleitung beruht auf einer Hochenergieentwicklung der ferromagnetischen Greenfunktion, die mit Hilfe der exakt berechenbaren Spektralmomente durchgeführt werden kann. Die Wechselwirkungsselbstenergie wird so angepasst, dass sie diese Entwicklung bis zu Termen der Ordnung  $(1/E)^2$  korrekt reproduziert. Es handelt sich also im Fall großer Energien  $E$  um eine kontrollierte Näherung, ähnlich wie die herkömmliche Störungstheorie für kleine Störungen.

Für die numerische Auswertung wurde der fixierte (linke) Ferromagnet in Mean Field- und der freie (rechte) Ferromagnet in NSDA-Näherung behandelt. Die Spinaufspaltung im linken Ferromagnet wurde dabei so groß gewählt, dass nur Spin Up-Zustände in der Nähe seiner Fermienergie vorhanden sind. Dadurch wurde er zu einem Halbmetall. Die Magnetisierungskurve zeigt in Abhängigkeit der angelegten Spannung ein Hystereseverhalten, wie es auch experimentell beobachtet wird. Damit kann durch Anlegen einer genügend großen Spannung mit geeignetem Vorzeichen kontrolliert zwischen den beiden Zuständen mit paralleler bzw. antiparalleler Ausrichtung der Magnetisierungen hin und her geschaltet werden. Die Erklärung dieses Phänomens im Rahmen des Modells beruht auf zwei unterschiedlichen Effekten, nämlich dem Einfluss der Hybridisierung und dem Tunnelstrom. Die Hybridisierung führt zu einer Abstoßung zwischen den Bändern, die

von ihrem energetischen Abstand, ihrem spektralen Gewicht und der Hybridisierungsstärke abhängt. Durch die Aufspaltung der Spinbänder in den Ferromagneten werden sie unterschiedlich stark verschoben. Dies kann dazu führen, dass sich die Magnetisierung durch die zusätzliche Abstoßung aufgrund der Hybridisierung entweder weiter stabilisiert oder geschwächt wird. Falls diese Schwächung eine kritische Grenze überschreitet, wird die Magnetisierung instabil und wird sich daher umorientieren. Der Tunnelstrom unterstützt diesen Effekt, da er, je nach Spannungsrichtung, zu einem Zu- bzw. Abfließen von Elektronen führt. Aufgrund der Aufspaltung des linken Ferromagneten, können allerdings nur Spin Up-Elektronen tunneln, mit entsprechenden Folgen für die Magnetisierung.

Es wurde gezeigt, dass das Hystereseverhalten nicht bei allen Parameterwerten auftritt. Um den Einfluss der Parameter systematisch zu untersuchen, wurde jeweils einer von ihnen variiert und alle anderen konstant gehalten. Es wurde sowohl das Verhalten ohne als auch mit angelegter Spannung betrachtet. Dabei wurde beobachtet, dass, bis auf die Bandbreite des Isolators, alle Parameter einen Einfluss auf das Schaltverhalten haben. Tendenziell konnte gezeigt werden, dass es mit größer werdender Magnetisierung schwieriger wurde sie umzuorientieren, d.h. dazu war eine höhere Spannung nötig. Insbesondere anhand der Magnetisierungskurve in Abhängigkeit der Hybridisierungsstärke konnte die Erklärung über den Abstoßungseffekt bestätigt werden, da die Magnetisierung erst oberhalb einer kritischen Stärke geschaltet werden konnte. Da auch der Tunnelstrom mit größerer Hybridisierung stark ansteigt, bedeutet dies, dass Schalten erst oberhalb einer kritischen Stromstärke möglich ist. Auch dieses Ergebnis stimmt mit dem Experiment überein.

Weiterhin wurde untersucht, ob die Magnetisierung auch geschaltet werden kann, wenn beide Ferromagnete in Mean Field-Näherung beschrieben werden. Dies entspricht der Situation, wie sie in den meisten anderen theoretischen Arbeiten zu diesem Thema angenommen wurde. Auch in diesem Fall ist es möglich, Schaltverhalten zu modellieren. Im Gegensatz zur NSDA-Näherung kann die Magnetisierung aber nur in einem relativ kleinen Parameterbereich geschaltet werden. Bereits bei moderaten Besetzungszahlen oder Coulomb-Wechselwirkungsstärken wird die Aufspaltung der Spinbänder, und damit die Magnetisierung, nämlich zu groß, um von der Abstoßung aufgrund der Hybridisierung überwunden werden zu können. Auch damit wird also die Beobachtung, dass die Stabilität der Magnetisierung entscheidenden Einfluss auf die Möglichkeit ihrer Umorientierung hat, bestätigt. Somit eignet sich die Mean Field-Näherung, aufgrund der Tatsache, dass sie die magnetische Stabilität deutlich überschätzt, nicht besonders gut zur theoretischen Beschreibung des Schaltens. Eine verbesserte Näherung, wie z.B. die NSDA, die eine realistischerere Abschätzung der Stabilität liefert, ist daher vorzuziehen. Die Beschreibung des linken Ferromagneten als Halbmetall stellt eine Vereinfachung gegenüber den meisten experimentellen Tunnelstrukturen dar, bei denen der fixierte Ferromagnet üblicherweise nicht vollständig gesättigt ist. Daher wurde auch im Modell der Versuch unternommen, diese Situation zu beschreiben. Dazu wurde der linke Ferromagnet in SDA-Näherung behandelt. Dies führte allerdings dazu, dass das Magnetisierungsverhalten sich von der normalen Hysteresekurve unterschied, da die antiparallele Ausrichtung sowohl für positive als auch negative Spannungen umorientiert werden kann.

te. Ein solches Verhalten wird im Experiment nicht beobachtet. Zwar versagt das Modell somit in diesem Fall, allerdings konnte zumindest die wahrscheinliche Ursache hierfür identifiziert werden. Bei der NSDA-Näherung wird die Quasiteilchendämpfung nämlich komplett vernachlässigt. Dies führt dazu, dass die Bänder zu hoch und insbesondere zu schmal werden. Dadurch kann es für negative Spannungen zu einer Vorzeichenänderung der Polarisierung des Stroms kommen, wodurch das Zurückschalten der Magnetisierung ausgelöst wird. Bei höheren Näherungen wird das Minoritätsband durch den Einfluss der Quasiteilchendämpfung dagegen üblicherweise breiter und weniger hoch, wodurch die Vorzeichenänderung der Polarisierung unter Umständen verhindert werden könnte. Damit wäre das Zurückschalten unterbunden und die Theorie würde auch in diesem Fall funktionieren. Somit ist festzuhalten, dass diese Nichtübereinstimmung mit dem Experiment vermutlich nicht dem Modell an sich, sondern lediglich der verwendeten Näherung geschuldet ist.

Die Hybridisierung zwischen zwei benachbarten Schichten hängt im Allgemeinen von den Wellenvektoren der beteiligten Zustände ab. Für die Herleitung der allgemeinen Theorie musste diese Abhängigkeit nicht weiter spezifiziert werden. Erst bei der Bestimmung der NSDA-Selbstenergie und der numerischen Auswertung wurden konkrete Annahmen über die Wellenzahlabhängigkeit verwendet. Die sogenannte Diagonalannahme bestand in der Forderung, dass Elektronen in einer Region mit einer bestimmten Wellenzahl nach dem Zurücktunneln in diese Region wieder die ursprüngliche Wellenzahl annehmen müssen. Die allgemeine Theorie kann, zumindest in Mean Field-Näherung, auch mit der Annahme, dass die Hybridisierungen gar nicht von der Wellenzahl abhängen, formuliert und ausgewertet werden. Somit hat sich ein Vergleich dieser beiden Methoden angeboten, um zu testen, ob die auf den ersten Blick recht willkürlich wirkende Diagonalannahme überhaupt zu glaubwürdigen Ergebnissen führt. Es konnte gezeigt werden, dass dies tatsächlich der Fall ist. Erst für sehr große Hybridisierungsstärken, die als unphysikalisch einzustufen sind, haben sich Unterschiede zwischen beiden Versionen gezeigt. Dies wurde damit begründet, dass Übergänge zwischen verschiedenen Wellenzahlen stark unterdrückt sind. Der Tunnelprozess erhält die Wellenzahl also in guter Näherung.

Die vorliegende Theorie kann auf vielfältige Weise erweitert werden. Einige dieser Erweiterungen wurden bereits angesprochen. Dazu zählt insbesondere die Berücksichtigung von Quasiteilchendämpfungseffekten durch eine verbesserte Näherung der Wechselwirkungsselbstenergie. Damit könnten mehrere Probleme auf einmal gelöst werden. Es sollte damit möglich sein, die Hysteresekurve auch für nicht vollständige Polarisierungen des fixierten Ferromagneten zu reproduzieren. Außerdem würden gewisse Artefakte, die bei der Verwendung der NSDA auftraten, verschwinden. Dazu gehören unter anderem die Instabilität der antiparallelen Phase bei  $\epsilon_{RP} = 0$  eV (vgl. Abschnitt 5.6.5) oder die Nichtbesetzung energetisch tief liegender Zustände, wenn die rechte Zustandsdichte über die der anderen Regionen hinausragt (vgl. Abschnitt 5.6.9). Im Gleichgewicht haben sich insbesondere die modifizierte Störungstheorie (MPT) [140, 141] und die dynamische Mean Field-Theorie (DMFT) [106, 107] als fortgeschrittene Näherungen zur Lösung des Hubbard-Modells bewährt. Diese müssten natürlich erst noch ins Nichtgleichgewicht übertragen werden. Für die DMFT gibt es bereits mehrere Arbeiten, die dies bewerk-

stellt haben [142, 143, 144, 145, 146]. Dabei ist der numerische Aufwand allerdings üblicherweise so hoch, dass es ohne Supercomputer sicherlich nicht möglich sein wird, einen auch nur annähernd so großen Parameterbereich wie mit der NSDA abzudecken. Beispielsweise geben die Autoren von Ref. [142] eine Rechenzeit von 600 000 CPU-Stunden für vier Stromkurven an!

Auch die Erweiterung des Modells auf mehrere Bänder würde die Übereinstimmung mit dem Experiment verbessern, da damit das Abfallen des Stroms bei hohen Spannungen verhindert werden könnte. Dieser Aspekt wurde in Abschnitt 5.5 bereits diskutiert. Allerdings würde eine solche Erweiterung, je nach Anzahl der zusätzlichen Bänder, die Zahl der freien Parameter enorm erhöhen. Daher wäre die Kombination der vorliegenden Theorie mit *ab initio*-Methoden [147, 148, 149] vermutlich die glaubwürdigste Methode mehrere Bänder in einer Region zu berücksichtigen. Damit wären dann unter Umständen auch quantitative Vergleiche mit dem Experiment möglich.

Der Ummagnetisierungsprozess selbst kann mit dem vorliegenden Modell nicht beschrieben werden. Dieses kann lediglich vorhersagen, *ob*, nicht jedoch *wie* das System schaltet, da es sich um eine stationäre Theorie handelt. Der Schaltprozess selbst ist jedoch explizit zeitabhängig. Daher wäre die Erweiterung auf zeitabhängige Störungen sicherlich eine interessante Aufgabe. Der Keldysh-Formalismus ist dazu auch ohne weiteres in der Lage [150], allerdings ist es schwierig, eine über Mean Field hinausgehende Näherung für das zeitabhängige Hubbard-Modell zu formulieren. Weiterhin müsste man das Modell auf beliebige relative Einstellungen der Magnetisierungen (also nicht nur parallel bzw. antiparallel) erweitern, um ihre Bewegung während des Schaltens zu erfassen [151].

Neben der „klassischen“ Tunnelstruktur, bestehend aus zwei ferromagnetischen Metallen, die durch einen nichtmagnetischen Isolator getrennt sind, werden in der Literatur auch andere Geometrien diskutiert. Dazu gehören beispielsweise ferromagnetische Isolatoren als Trennschicht [152] oder die Ersetzung eines Ferromagneten durch einen Antiferromagneten [153] oder einen Supraleiter [154, 155, 156]. Zwar wird in diesen Systemen üblicherweise kein Schalten beobachtet, nichtsdestotrotz können ihre Transporteigenschaften aber prinzipiell mit Hilfe geeigneter Erweiterungen des vorliegenden Modells berechnet werden. Natürlich sind diese Erweiterungen keineswegs trivial, daher bieten sie sicherlich noch genügend Stoff für weitere Doktorarbeiten.



# (Anti-)Kommutatorrelationen

In diesem Anhang werden die Ergebnisse der im Rahmen der Herleitungen im Hauptteil benötigten Kommutator- und Antikommutatorrelationen angegeben. Sie können durch Einsetzen der Operatoren und einfacher, aber typischerweise mühseliger, Berechnung bewiesen werden.

## .1 Allgemeine Kommutatoren und Antikommutatoren für Fermionen

Folgende Kommutatoren zwischen Fermionenoperatoren treten auf:

$$\left[ c_{iR\sigma} c_{iR-\sigma}, n_{jR-\sigma} c_{jR\sigma}^+ \right]_- = c_{iR-\sigma} (n_{iR\sigma} - 1) \delta_{iRjR} \quad (.1)$$

$$\left[ c_{iR\sigma} c_{iR-\sigma}^+, n_{jR-\sigma} c_{jR\sigma}^+ \right]_- = -c_{iR-\sigma}^+ n_{iR\sigma} \delta_{iRjR} \quad (.2)$$

Außerdem werden mehrere Antikommutatoren benötigt:

$$\left[ c_{lR\sigma} n_{lR-\sigma}, n_{jR-\sigma} c_{jR\sigma}^+ \right]_+ = n_{jR-\sigma} \delta_{lRjR} \quad (.3)$$

$$\begin{aligned} \left[ c_{iR\sigma} c_{iR-\sigma}^+ c_{lR-\sigma}, n_{jR-\sigma} c_{jR\sigma}^+ \right]_+ &= n_{iR-\sigma} \delta_{iRjR} \delta_{iRlR} + c_{iR-\sigma}^+ c_{lR-\sigma} n_{iR\sigma} \delta_{iRjR} + \\ &+ c_{iR-\sigma}^+ c_{jR\sigma}^+ c_{jR-\sigma} c_{iR\sigma} \delta_{jRlR} \end{aligned} \quad (.4)$$

$$\left[ c_{iR\sigma} c_{lR-\sigma}^+ c_{iR-\sigma}, n_{jR-\sigma} c_{jR\sigma}^+ \right]_+ = c_{lR-\sigma}^+ c_{iR-\sigma} (1 - n_{iR\sigma}) \delta_{iRjR} - c_{jR-\sigma}^+ c_{jR\sigma}^+ c_{iR-\sigma} c_{iR\sigma} \delta_{jRlR} \quad (.5)$$

$$\left[ c_{lR\sigma} n_{iR-\sigma}, n_{jR-\sigma} c_{jR\sigma}^+ \right]_+ = n_{iR-\sigma} n_{jR-\sigma} \delta_{lRjR} \quad (.6)$$

$$\left[ c_{iR\sigma} n_{iR-\sigma}, n_{jR-\sigma} c_{jR\sigma}^+ \right]_+ = n_{iR-\sigma} \delta_{iRjR} \quad (.7)$$

## .2 Kommutatoren mit dem Hamilton-Operator (3.2)

### .2.1 Ortsdarstellung

In Ortsdarstellung ist der Hamilton-Operator durch (3.3) bis (3.5) gegeben und für die auftretenden Kommutatoren gilt:

$$[c_{i_R\sigma}, H]_- = \sum_{l_R} T_{i_R l_R} c_{l_R\sigma} + U_R c_{i_R\sigma} n_{i_R-\sigma} + \sum_{X=I,P} \sum_{i_X} T_{i_R i_X} d_{i_X\sigma} \quad (.8)$$

$$[H, c_{j_R\sigma}^+]_- = \sum_{l_R} T_{l_R j_R} c_{l_R\sigma}^+ + U_R n_{j_R-\sigma} c_{j_R\sigma}^+ + \sum_{X=I,P} \sum_{i_X} T_{i_X j_R} d_{i_X\sigma}^+ \quad (.9)$$

$$[d_{i_I\sigma}, H]_- = \sum_{j_I} T_{i_I j_I} d_{j_I\sigma} + \sum_{j_L} T_{i_I j_L} c_{j_L\sigma} + \sum_{j_R} T_{i_I j_R} c_{j_R\sigma} \quad (.10)$$

$$[d_{i_P\sigma}, H]_- = \sum_{j_P} T_{i_P j_P} d_{j_P\sigma} + \sum_{j_R} T_{i_P j_R} c_{j_R\sigma} \quad (.11)$$

$$\begin{aligned} [c_{i_R\sigma} n_{i_R-\sigma}, H]_- &= \sum_{l_R} T_{i_R l_R} (c_{i_R\sigma} c_{l_R-\sigma}^+ c_{l_R-\sigma} + c_{l_R\sigma} n_{i_R-\sigma} - c_{i_R\sigma} c_{l_R-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma}) + \\ &+ \sum_{X=I,P} \sum_{i_X} T_{i_R i_X} (c_{i_R\sigma} c_{i_X-\sigma}^+ d_{i_X-\sigma} + d_{i_X\sigma} n_{i_R-\sigma} - c_{i_R\sigma} d_{i_X-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma}) + \\ &+ U_R c_{i_R\sigma} n_{i_R-\sigma} \end{aligned} \quad (.12)$$

Bei der Berechnung des letzten Kommutators wurde benutzt, dass die Hoppingelemente reell und symmetrisch sind, wodurch  $T_{i_X j_Y} = T_{j_Y i_X}$  gilt. Mit Hilfe dieser Beziehungen lassen sich nun auch höhere Kommutatoren berechnen, die bei der Herleitung der NSDA eine Rolle spielen:

$$\begin{aligned} [[c_{i_R\sigma}, H]_-, H]_- &\stackrel{(.8)}{=} \sum_{l_R} T_{i_R l_R} [c_{l_R\sigma}, H]_- + U_R [c_{i_R\sigma} n_{i_R-\sigma}, H]_- + \\ &+ \sum_{X=I,P} \sum_{i_X} T_{i_R i_X} [d_{i_X\sigma}, H]_- \\ &\stackrel{(.8),(.10)}{=} \sum_{l_R l'_R} T_{i_R l_R} T_{l_R l'_R} c_{l'_R\sigma} + \sum_{X=I,P} \left\{ \sum_{l_R i_X} T_{i_R l_R} T_{l_R i_X} d_{i_X\sigma} + \right. \\ &+ \sum_{i_X j_X} T_{i_R i_X} T_{i_X j_X} d_{j_X\sigma} + \sum_{i_X j_R} T_{i_R i_X} T_{i_X j_R} c_{j_R\sigma} \left. \right\} + \sum_{i_I j_L} T_{i_R i_I} T_{i_I j_L} c_{j_L\sigma} + \\ &+ U_R \sum_{l_R} T_{i_R l_R} (c_{l_R\sigma} n_{l_R-\sigma} + c_{i_R\sigma} c_{l_R-\sigma}^+ c_{l_R-\sigma} + c_{l_R\sigma} n_{i_R-\sigma} - \\ &- c_{i_R\sigma} c_{l_R-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma}) + U_R \sum_{X=I,P} \sum_{i_X} T_{i_R i_X} (c_{i_R\sigma} c_{i_X-\sigma}^+ d_{i_X-\sigma} + \\ &+ d_{i_X\sigma} n_{i_R-\sigma} - c_{i_R\sigma} d_{i_X-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma}) + U_R^2 c_{i_R\sigma} n_{i_R-\sigma} \end{aligned} \quad (.13)$$

## .2.2 Wellenzahldarstellung

Die Terme des Hamilton-Operators sind in Wellenzahldarstellung durch (3.10) bis (3.12) gegeben. Folgende Kommutatoren werden im Rahmen der Auswertung der Theorie benötigt:

$$[c_{\mathbf{k}_R\sigma}, H]_- = \epsilon_{\mathbf{k}_R} c_{\mathbf{k}_R\sigma} + [c_{\mathbf{k}_R\sigma}, H_{int}^R]_- + \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R\mathbf{k}_X} d_{\mathbf{k}_X\sigma} \quad (.14)$$

$$[d_{\mathbf{k}_P\sigma}, H]_- = \epsilon_{\mathbf{k}_P} d_{\mathbf{k}_P\sigma} + \sum_{\mathbf{q}_R} \epsilon_{\mathbf{k}_P\mathbf{q}_R} c_{\mathbf{q}_R\sigma} \quad (.15)$$

$$[d_{\mathbf{k}_I\sigma}, H]_- = \epsilon_{\mathbf{k}_I} d_{\mathbf{k}_I\sigma} + \sum_{M=L,R} \sum_{\mathbf{q}_M} \epsilon_{\mathbf{k}_I\mathbf{q}_M} c_{\mathbf{q}_M\sigma} \quad (.16)$$

$$[c_{\mathbf{k}_L\sigma}, H]_- = \epsilon_{\mathbf{k}_L} c_{\mathbf{k}_L\sigma} + [c_{\mathbf{k}_L\sigma}, H_{int}^L]_- + \sum_{\mathbf{q}_I} \epsilon_{\mathbf{k}_L\mathbf{q}_I} d_{\mathbf{q}_I\sigma} \quad (.17)$$

Dabei stehen  $H_{int}^R$  und  $H_{int}^L$  für die Hubbard-Anteile der Hamilton-Operatoren (3.10) der beiden Ferromagnete.

## .3 Antikommutatoren mit dem Hamilton-Operator (3.2)

$$\left[ [c_{i_R\sigma}, H]_-, c_{j_R\sigma}^+ \right]_+ \stackrel{(.8)}{=} T_{i_R j_R} + U_R n_{i_R-\sigma} \delta_{i_R j_R} \quad (.18)$$

$$\left[ [d_{i_I\sigma}, H]_-, d_{j_I\sigma}^+ \right]_+ \stackrel{(.10)}{=} T_{i_I j_I} \quad (.19)$$

$$\left[ [d_{i_P\sigma}, H]_-, d_{j_P\sigma}^+ \right]_+ \stackrel{(.11)}{=} T_{i_P j_P} \quad (.20)$$

$$\begin{aligned} \left[ [c_{i_R\sigma}, H]_-, [H, c_{j_R\sigma}^+]_- \right]_+ &\stackrel{(.8),(.9)}{=} \sum_{l_R} T_{i_R l_R} T_{l_R j_R} + U_R T_{i_R j_R} (n_{j_R-\sigma} + n_{i_R-\sigma}) + \\ &+ U_R^2 n_{i_R-\sigma} \delta_{i_R j_R} + \sum_{X=I,P} \sum_{i_X} T_{i_R i_X} T_{i_X j_R} \end{aligned} \quad (.21)$$

## .4 Berechnung des Antikommutators aus Gleichung (4.28)

In diesem Abschnitt soll der Antikommutator

$$\left[ [ [c_{i_R\sigma}, H]_-, H ]_-, [H, c_{j_R\sigma}^+]_- \right]_+, \quad (.22)$$

der bei der Berechnung des dritten Moments des rechten Ferromagneten benötigt wird, abgeleitet werden. Dabei arbeitet man sich zweckmäßigerweise von innen nach außen vor. Die beiden inneren Kommutatoren sind in Gl. (.13) und (.9) bereits angegeben worden. Setzt man diese in den Antikommutator ein und sortiert das Ergebnis nach Potenzen

(Anti-)Kommutatorrelationen

von  $U_R$  ergibt sich der Ausdruck:

$$\left[ [[c_{i_R\sigma}, H]_-, H]_-, [H, c_{j_R\sigma}^+]_- \right]_+ = A_0 + U_R A_1 + U_R^2 A_2 + U_R^3 A_3, \quad (.23)$$

wobei die folgenden Abkürzungen benutzt wurden:

$$A_0 = \sum_{l_R l'_R} T_{i_R l_R} T_{l_R l'_R} T_{l'_R j_R} + \sum_{X=I,P} \left( \sum_{i_X l_R} (T_{i_R l_R} T_{l_R i_X} T_{i_X j_R} + T_{i_R i_X} T_{i_X l_R} T_{l_R j_R}) + \sum_{i_X j_X} T_{i_R i_X} T_{i_X j_X} T_{j_X j_R} \right) \quad (.24)$$

$$A_1 = \sum_{l_R} \left( T_{i_R l_R} T_{l_R j_R} (n_{i_R-\sigma} + n_{j_R-\sigma} + n_{l_R-\sigma} + c_{i_R-\sigma}^+ c_{l_R-\sigma}) - T_{l_R i_R} T_{i_R j_R} c_{l_R-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} \right) + \sum_{X=I,P} \sum_{i_X} \left( T_{i_R i_X} (T_{i_R j_R} c_{i_R-\sigma}^+ d_{i_X-\sigma} + T_{i_X j_R} (n_{i_R-\sigma} + n_{j_R-\sigma})) - T_{i_X i_R} T_{i_R j_R} d_{i_X-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} \right) \quad (.25)$$

$$A_2 = T_{i_R j_R} n_{i_R-\sigma} + \sum_{l_R} \left( T_{i_R l_R} ([c_{l_R\sigma} n_{l_R-\sigma}, n_{j_R-\sigma} c_{j_R\sigma}^+]_+ + [c_{i_R\sigma} c_{i_R-\sigma}^+ c_{l_R-\sigma}, n_{j_R-\sigma} c_{j_R\sigma}^+]_+ + [c_{l_R\sigma} n_{i_R-\sigma}, n_{j_R-\sigma} c_{j_R\sigma}^+]_+) - T_{l_R i_R} [c_{i_R\sigma} c_{l_R-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma}, n_{j_R-\sigma} c_{j_R\sigma}^+]_+ \right) + \sum_{X=I,P} \sum_{i_X} \left( T_{i_X i_R} d_{i_X-\sigma}^+ [c_{i_R\sigma} c_{i_R-\sigma}, n_{j_R-\sigma} c_{j_R\sigma}^+]_- - T_{i_R i_X} [c_{i_R\sigma} c_{i_R-\sigma}^+, n_{j_R-\sigma} c_{j_R\sigma}^+]_- d_{i_X-\sigma} \right) = T_{i_R j_R} (n_{i_R-\sigma} + n_{j_R-\sigma} + n_{i_R-\sigma} n_{j_R-\sigma}) + T_{i_R i_R} n_{i_R-\sigma} \delta_{i_R j_R} + T_{i_R j_R} c_{i_R-\sigma}^+ c_{j_R\sigma}^+ c_{j_R-\sigma} c_{i_R\sigma} + T_{j_R i_R} c_{j_R-\sigma}^+ c_{j_R\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} c_{i_R\sigma} + \sum_{l_R} \left( T_{i_R l_R} c_{i_R-\sigma}^+ c_{l_R-\sigma} n_{i_R\sigma} + T_{l_R i_R} c_{l_R-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} (n_{i_R\sigma} - 1) \right) \delta_{i_R j_R} + \sum_{X=I,P} \sum_{i_X} \left( T_{i_R i_X} c_{i_R-\sigma}^+ n_{i_R\sigma} d_{i_X-\sigma} + T_{i_X i_R} d_{i_X-\sigma}^+ c_{i_R-\sigma} (n_{i_R\sigma} - 1) \right) \delta_{i_R j_R} \quad (.26)$$

$$A_3 = [c_{i_R\sigma} n_{i_R-\sigma}, n_{j_R-\sigma} c_{j_R\sigma}^+]_+ \stackrel{(.7)}{=} n_{i_R-\sigma} \delta_{i_R j_R} \quad (.27)$$

Bei der Berechnung von  $A_2$  wurden die Beziehungen (.1) bis (.6) verwendet.

# Einige analytische Details

## .5 Spektraldarstellung

Der Beweis der Spektraldarstellung der retardierten Greenfunktion, die bei der Herleitung der NSDA benötigt wird, erfolgt vollkommen analog zum Gleichgewicht [71]. Nichtsdestotrotz soll er in diesem Anhang noch einmal durchgeführt werden, um klar zu machen, dass an keiner Stelle des Beweises thermodynamisches Gleichgewicht vorausgesetzt werden muss. Ausgehend von der Definition der retardierten Greenfunktion

$$G_{AB}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_+ \rangle, \quad (.28)$$

der Spektraldichte

$$S_{AB}(t, t') = \frac{1}{2\pi} \langle [A(t), B(t')]_+ \rangle \quad (.29)$$

und der folgenden Darstellung der Stufenfunktion:

$$\theta(t - t') = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-ix(t-t')}}{x + i0^+} \quad (.30)$$

zeigt man für die energieabhängige Greenfunktion:

$$\begin{aligned} G_{AB}^r(E) &= -i \int_{-\infty}^{\infty} d(t - t') e^{iE(t-t')} \theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_+ \rangle \\ &= -2\pi i \int_{-\infty}^{\infty} d(t - t') e^{iE(t-t')} \theta(t - t') S_{AB}(t, t') \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} d(t - t') e^{iE(t-t')} \theta(t - t') \int_{-\infty}^{\infty} dE' S_{AB}(E') e^{-iE'(t-t')} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{S_{AB}(E')}{x + i0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d(t - t') e^{-i(x-E+E')(t-t')} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dE' \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{S_{AB}(E')}{x + i0^+} \delta(x - (E - E')) \end{aligned} \quad (.31)$$

Durch die Deltafunktion kann das  $x$ -Integral eliminiert werden und es bleibt die Spektraldarstellung der retardierten Greenfunktion:

$$G_{AB}^r(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{S_{AB}(E')}{E - E' + i0^+} \quad (.32)$$

Für den Beweis wurden lediglich die Definitionen der Größen und einige allgemeingültige mathematische Ausdrücke benutzt. Insbesondere wurden keine Annahmen bezüglich

der thermodynamischen Mittelung benötigt. Daher bleibt die Spektraldarstellung, im Gegensatz zum Spektraltheorem, auch im Nichtgleichgewicht gültig.

Mit Hilfe der Spektraldarstellung und der Dirac-Identität (3.89) lässt sich ein weiterer wichtiger Zusammenhang zwischen Spektraldichte und Greenfunktion zeigen. Unter Voraussetzung einer reellen Spektraldichte gilt nämlich:

$$\begin{aligned}\operatorname{Im} G_{AB}^r(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} dE' S_{AB}(E') \operatorname{Im} \left( \frac{1}{E - E' + i0^+} \right) \\ &= -\pi \int_{-\infty}^{\infty} dE' S_{AB}(E') \delta(E - E') \\ &= -\pi S_{AB}(E)\end{aligned}\tag{.33}$$

## **.6 Fouriertransformation der Bandkorrektur (4.33)**

Zur Berechnung der Bandkorrektur  $B_{1,-\sigma}(\mathbf{k}_R)$ , die in Gleichung (4.33) definiert wurde, muss die Fouriertransformation explizit durchgeführt werden. Man erhält für den ersten

Term:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N} \sum_{X=I,P} \sum_{i_R j_R i_X} e^{-i\mathbf{k}_R \cdot (\mathbf{R}_{i_R} - \mathbf{R}_{j_R})} T_{i_R j_R} T_{i_R i_X} \langle c_{i_R - \sigma}^+ d_{i_X - \sigma} \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{X=I,P} \sum_{i_R j_R i_X} e^{-i\mathbf{k}_R \cdot (\mathbf{R}_{i_R} - \mathbf{R}_{j_R})} T_{i_R j_R} \left( \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} e^{+i(\mathbf{q}_R \cdot \mathbf{R}_{i_R} - \mathbf{k}_X \cdot \mathbf{R}_{i_X})} \right) \times \\
&\quad \times \left( \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}'_R \mathbf{q}_X} \langle c_{\mathbf{q}'_R - \sigma}^+ d_{\mathbf{q}_X - \sigma} \rangle e^{+i(\mathbf{q}_X \cdot \mathbf{R}_{i_X} - \mathbf{q}'_R \cdot \mathbf{R}_{i_R})} \right) \\
&= \frac{1}{N^2} \sum_{X=I,P} \sum_{i_R j_R} \sum_{\substack{\mathbf{q}_R \mathbf{q}'_R \\ \mathbf{k}_X \mathbf{q}_X}} e^{-i(\mathbf{k}_R - \mathbf{q}_R + \mathbf{q}'_R) \cdot \mathbf{R}_{i_R}} e^{i\mathbf{k}_R \cdot \mathbf{R}_{j_R}} T_{i_R j_R} \epsilon_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} \langle c_{\mathbf{q}'_R - \sigma}^+ d_{\mathbf{q}_X - \sigma} \rangle \times \\
&\quad \times \underbrace{\left( \frac{1}{N} \sum_{i_X} e^{i(\mathbf{q}_X - \mathbf{k}_X) \cdot \mathbf{R}_{i_X}} \right)}_{=\delta_{\mathbf{q}_X \mathbf{k}_X}} \\
&= \frac{1}{N^2} \sum_{X=I,P} \sum_{i_R} \sum_{\substack{\mathbf{q}_R \mathbf{q}'_R \\ \mathbf{k}_X \mathbf{p}_R}} e^{-i(\mathbf{k}_R - \mathbf{q}_R + \mathbf{q}'_R - \mathbf{p}_R) \cdot \mathbf{R}_{i_R}} \underbrace{\left( \frac{1}{N} \sum_{j_R} e^{i(\mathbf{k}_R - \mathbf{p}_R) \cdot \mathbf{R}_{j_R}} \right)}_{=\delta_{\mathbf{k}_R \mathbf{p}_R}} \epsilon_{\mathbf{p}_R} \epsilon_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} \times \\
&\quad \times \langle c_{\mathbf{q}'_R - \sigma}^+ d_{\mathbf{k}_X - \sigma} \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{q}_R \mathbf{q}'_R \mathbf{k}_X} \underbrace{\left( \frac{1}{N} \sum_{i_R} e^{i(\mathbf{q}'_R - \mathbf{q}_R) \cdot \mathbf{R}_{i_R}} \right)}_{=\delta_{\mathbf{q}'_R \mathbf{q}_R}} \epsilon_{\mathbf{k}_R} \epsilon_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} \langle c_{\mathbf{q}'_R - \sigma}^+ d_{\mathbf{k}_X - \sigma} \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R} \epsilon_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} \langle c_{\mathbf{q}_R - \sigma}^+ d_{\mathbf{k}_X - \sigma} \rangle \tag{.34}
\end{aligned}$$

Der zweite Term transformiert sich vollkommen analog und es ergibt sich:

$$B_{1,-\sigma}(\mathbf{k}_R) = \frac{1}{N} \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} \epsilon_{\mathbf{k}_R} \left( \epsilon_{\mathbf{q}_R \mathbf{k}_X} \langle c_{\mathbf{q}_R - \sigma}^+ d_{\mathbf{k}_X - \sigma} \rangle - \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{q}_R} \langle d_{\mathbf{k}_X - \sigma}^+ c_{\mathbf{q}_R - \sigma} \rangle \right) \tag{.35}$$

## .7 Tunnelbandkorrektur

Für die Tunnelbandkorrektur  $B_{T,-\sigma}$  wurde folgender Ausdruck gefunden (s. Gl. (4.67)):

$$\begin{aligned}
B_{T,-\sigma} &= \frac{i}{2\pi N} \sum_{X=I,P} \sum_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left\{ \frac{2}{U_R} \left[ (-E + \epsilon_{\mathbf{k}_R} + \Delta_{\mathbf{k}_R - \sigma}^r(E)) \times \right. \right. \\
&\quad \times G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X - \sigma}^<(E) \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} + \Delta_{\mathbf{k}_R - \sigma}^<(E) G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X - \sigma}^a(E) \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} \left. \right] + \\
&\quad \left. + G_{\mathbf{k}_R \mathbf{k}_X - \sigma}^<(E) \epsilon_{\mathbf{k}_X \mathbf{k}_R} \right\} \tag{.36}
\end{aligned}$$

Durch Einsetzen der gemischten Greenfunktionen (4.53) und (4.54) ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 B_{T,-\sigma} = & \frac{i}{2\pi N} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left\{ \frac{2}{U_R} \left[ (-E + \epsilon_{\mathbf{k}_R} + \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E)) \times \right. \right. \\
 & \times (G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E) \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) + G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a(E)) + \\
 & + \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a(E) \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a(E) \left. \right] - G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E) \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) - \\
 & \left. - G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a(E) \right\} \quad (.37)
 \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Greenfunktion

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}^{r,a}(E) = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^{r,a}(E) - \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{r,a}(E)} \quad (.38)$$

und der Keldysh-Gleichung

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) = G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r(E) \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E) G_{\mathbf{k}_R\sigma}^a(E) \quad (.39)$$

lässt sich der Term in eckigen Klammern im Integranden weiter zusammenfassen:

$$\begin{aligned}
 & \left[ (-E + \epsilon_{\mathbf{k}_R} + \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r) (G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< + G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a) + \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \right] = \\
 & = - \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \right) \left( (G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a)^{-1} + \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \right) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< + (G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r)^{-1} G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \\
 & = - \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \right) \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a - \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a + \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \right) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< + \\
 & \quad + \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r - \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \right) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \\
 & = \left[ - \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \right) \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \right) + \right. \\
 & \quad \left. + \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r - \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \right) \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \right] G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< \\
 & = \left[ - \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \right) \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a - \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \right) - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \right] G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< \\
 & = \left[ - \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r - \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \right) \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a - \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \right) - \right. \\
 & \quad \left. - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a - \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a + \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \right) \right] G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< \\
 & = - (G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r)^{-1} G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< (G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a)^{-1} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \right) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< \\
 & = - \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \right) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< \quad (.40)
 \end{aligned}$$

Für den verbleibenden Term in den geschweiften Klammern unter dem Integral gilt:

$$\begin{aligned}
 G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< + G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a & = \left( (G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a)^{-1} + \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \right) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< \\
 & = \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a \right) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^< \quad (.41)
 \end{aligned}$$



Insgesamt findet man also für  $B_{T,-\sigma}$ :

$$\begin{aligned}
 B_{T,-\sigma} &= \frac{i}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}_R} \int dE \left\{ \frac{2}{U_R} [-\Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E) \times \right. \\
 &\quad \times (E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a(E)) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E)] + (E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a(E)) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) \Big\} \\
 &= -\frac{i}{2\pi N} \sum_{\mathbf{k}_R} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[ (E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^a(E)) \left( \frac{2}{U_R} \Sigma_{\mathbf{k}_R-\sigma}^r(E) - 1 \right) G_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{2}{U_R} \Delta_{\mathbf{k}_R-\sigma}^<(E) \right] \tag{.42}
 \end{aligned}$$

## .8 Exakte Lösung ohne Wellenzahlerhaltung

In diesem Abschnitt wird der Ausdruck (5.18) ausgehend von der kleineren Greenfunktion (3.113)

$$G_{\mathbf{k}_R\sigma}^< = (\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^< + \hat{\Delta}_{\mathbf{k}_R\sigma}^<) |G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r|^2 \tag{.43}$$

bewiesen. Für den rechten Ferromagneten wird die Mean Field-Selbstenergie benutzt, für die  $\Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma}^< \equiv 0$  gilt. Damit folgt wegen Gl. (3.121) unmittelbar  $F_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\prime <} = 0$ . Daher kann die kleinere effektive Tunnelselbstenergie ausgehend von Gl. (3.119) folgendermaßen umgeformt werden:

$$\begin{aligned}
 \hat{\Delta}_{\mathbf{k}_R\sigma}^< &= \frac{\Delta_{R\sigma}^<}{|1 - (F_{R\sigma}^r - F_{\mathbf{k}_R\sigma}^r) \Delta_{R\sigma}^r|^2} \\
 &= \frac{\Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^<}{|F_{\mathbf{k}_R\sigma}^r [(F_{\mathbf{k}_R\sigma})^{-1} (1 - F_{R\sigma}^r \Delta_{R\sigma}^r) + \Delta_{R\sigma}^r]|^2} \\
 &= \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^< \left| \frac{(F_{\mathbf{k}_R\sigma})^{-1}}{(F_{\mathbf{k}_R\sigma})^{-1} (1 - F_{R\sigma}^r \Delta_{R\sigma}^r) + \Delta_{R\sigma}^r} \right|^2 \tag{.44}
 \end{aligned}$$

Die retardierte Greenfunktion (3.111) wird auf ähnliche Weise umgestellt:

$$\begin{aligned}
 G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r &= \left( E - \epsilon_{\mathbf{k}_R} - \Sigma_{\mathbf{k}_R\sigma} - \frac{\Delta_{R\sigma}^r}{1 - (F_{R\sigma}^r - F_{\mathbf{k}_R\sigma}^r) \Delta_{R\sigma}^r} \right)^{-1} \\
 &\stackrel{(3.104)}{=} \left( (F_{\mathbf{k}_R\sigma}^r)^{-1} - \frac{(F_{\mathbf{k}_R\sigma})^{-1} \Delta_{R\sigma}^r}{(F_{\mathbf{k}_R\sigma})^{-1} (1 - F_{R\sigma}^r \Delta_{R\sigma}^r) + \Delta_{R\sigma}^r} \right)^{-1} \\
 &= \frac{F_{\mathbf{k}_R\sigma}^r}{1 - \frac{\Delta_{R\sigma}^r}{(F_{\mathbf{k}_R\sigma})^{-1} (1 - F_{R\sigma}^r \Delta_{R\sigma}^r) + \Delta_{R\sigma}^r}} \tag{.45}
 \end{aligned}$$

Diese beiden Ausdrücke für die Tunnelselbstenergie und die Greenfunktion werden nun in die Keldysh-Gleichung eingesetzt und man erhält nach einigen Umformungen das

Ergebnis (5.18):

$$\begin{aligned}
 G_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\leq} &= \hat{\Delta}_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\leq} |G_{\mathbf{k}_R\sigma}^r|^2 \\
 &= \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\leq} \left| \frac{(F_{\mathbf{k}_R\sigma})^{-1}}{(F_{\mathbf{k}_R\sigma})^{-1}(1 - F_{R\sigma}^r \Delta_{R\sigma}^r) + \Delta_{R\sigma}^r} \right|^2 \left| \frac{F_{\mathbf{k}_R\sigma}^r}{1 - \frac{\Delta_{R\sigma}^r}{(F_{\mathbf{k}_R\sigma}^r)^{-1}(1 - F_{R\sigma}^r \Delta_{R\sigma}^r) + \Delta_{R\sigma}^r}} \right|^2 \\
 &= \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\leq} \left| \frac{1}{(F_{\mathbf{k}_R\sigma}^r)^{-1}(1 - F_{R\sigma}^r \Delta_{R\sigma}^r) + \Delta_{R\sigma}^r - \Delta_{R\sigma}^r} \right|^2 \\
 &= \Delta_{\mathbf{k}_R\sigma}^{\leq} \left| \frac{F_{\mathbf{k}_R\sigma}^r}{1 - F_{R\sigma}^r \Delta_{R\sigma}^r} \right|^2
 \end{aligned} \tag{.46}$$

# Literaturverzeichnis

- [1] BINASCH, G. ; GRÜNBERG, P. ; SAURENBACH, F. ; ZINN, W.: . In: *Phys. Rev. B* 39 (1989), S. 4828
- [2] BAIBICH, M. N. ; BROTO, J. M. ; FERT, A. ; NGUYEN VAN DAU, F. ; PETROFF, F. ; EITENNE, F. ; CREUZET, G. ; FRIEDERICH, A. ; CHAZELAS, J.: . In: *Phys. Rev. Lett* 61 (1988), S. 2472
- [3] PRINZ, G. A.: . In: *Science* 282 (1998), S. 1660
- [4] ŽUTIĆ, I. ; FABIAN, J. ; DAS SARMA, S.: . In: *Rev. Mod. Phys.* 76 (2004), S. 323
- [5] WOLF, S. A. ; AWSCHALOM, D. D. ; BUHRMAN, R. A. ; DAUGHTON, J. M. ; VON MOLNÁR, S. ; ROUKES, M. L. ; CHTCHELKANOVA, A. Y. ; TREGER, D. M.: . In: *Science* 294 (2001), S. 1488
- [6] HARTMANN, U. (Hrsg.): *Magnetic Multilayers and Giant Magnetoresistance*. Berlin : Springer, 2000
- [7] HIROTA, E. ; SAKAKIMA, H. ; INOMATA, K.: *Giant Magneto-Resistance Devices*. Berlin : Springer, 2002
- [8] PARKIN, S. S. P. ; MAEKAWA, S. (Hrsg.) ; SHINJO, T. (Hrsg.): *Spin-Dependent Transport in Magnetic Nanostructures*. New York : Taylor and Francis, 2002
- [9] GRÜNBERG, P.: . In: *Sensors and Actuators A* 91 (2001), S. 91
- [10] SLONCZEWSKI, J. C.: . In: *J. Magn. Magn. Mater.* 159 (1996), S. L1
- [11] BERGER, L.: . In: *Phys. Rev. B* 54 (1996), S. 9353
- [12] DASSOW, H. ; LEHNDORFF, R. ; BÜRGLE, D. E. ; BUCHMEIER, M. ; GRÜNBERG, P. A. ; SCHNEIDER, C. M. ; VAN DER HART, A.: . In: *Appl. Phys. Lett.* 89 (2006), S. 222511
- [13] BÜRGLE, D. E.: Advanced Magnetic Switching Concepts. In: *Magnetism goes Nano*. Jülich : Institut für Festkörperforschung des Forschungszentrums Jülich, 2005 (36. IFF-Frühjahrsschule), S. E6.1
- [14] KISELEV, S. I. ; SANKEY, J. C. ; KRIVOROTOV, I. N. ; EMLEY, N. E. ; SCHOELKOPF, R. J. ; BUHRMAN, R. A. ; RALPH, D. C.: . In: *Nature* 425 (2003), S. 380

- [15] MYERS, E. B. ; RALPH, D. C. ; KATINE, J. A. ; LOUIE, R. N. ; BUHRMAN, R. A.:  
 . In: *Science* 285 (1999), S. 867
- [16] GROLLIER, J. ; HAMZIC, A. ; GEORGE, J. M. ; JAFFRÉS, H. ; FERT, A. ; FAINI, G. ; BEN YOUSSEFF, J. ; LEGALL, H.: . In: *Appl. Phys. Lett.* 78 (2001), S. 3663
- [17] WEGROWE, J.-E. ; KELLY, D. ; TRUONG, T. ; GUITTENNE, P. ; J.-P., Ansermet:  
 . In: *Europhys. Lett.* 56 (2001), S. 56
- [18] TSOI, M. ; JANSEN, A. G. M. ; BASS, J. ; CHIANG, W.-C. ; SECK, M. ; TSOI, V. ;  
 WYDER, P.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998), S. 4281
- [19] DEAC, A. ; REDON, O. ; SOUSA, C. ; DIENY, B. ; NOZIÉRES ; ZHANG, Z. ; LIU, Y.  
 ; FREITAS, P. P.: . In: *J. Appl. Phys.* 95 (2004), S. 6792
- [20] DIAO, Z. ; APALKOV, D. ; PAKALA, M. ; DING, Y. ; PANCHULA, A. ; HUAI, Y.: .  
 In: *Appl. Phys. Lett.* 87 (2005), S. 232502
- [21] FUCHS, G. D. ; EMLEY, N. C. ; KRIVOROTOV, I. N. ; BRAGANCA, P. M. ; RYAN,  
 E. M. ; KISELEV, S. I. ; SANKEY, J. C. ; RALPH, D. C. ; BUHRMAN, R. A. ; KATINE,  
 J. A.: . In: *Appl. Phys. Lett.* 85 (2004), S. 1205
- [22] OLIVER, B. ; HE, Q. ; TANG, X. ; NOWAK, J.: . In: *J. Appl. Phys.* 91 (2002), S.  
 4348
- [23] BOWEN, M. ; CROS, V. ; PETROFF, F. ; FERT, A. ; MARTINEZ BOUBETA, C.  
 ; COSTA-KRAMER, J. L. ; ANGUITA, J. V. ; CEBOLLADA, A. ; BRIONES, F. ;  
 DE TERESA, J. M. ; MORELLON, L. ; IBARRA, M. R. ; GUELL, F. ; PEIRO, F. ;  
 CORNET, A.: . In: *Appl. Phys. Lett.* 79 (2001), S. 1655
- [24] YUASA, S. ; KATAYAMA, T. ; NAGAHAMA, T. ; FUKUSHIMA, A. ; KUBOTA, H. ;  
 SUZUKI, Y. ; ANDO, K.: . In: *Appl. Phys. Lett.* 87 (2005), S. 222508
- [25] PARKIN, S. S. P. ; KAISER, C. ; PANCHULA, A. ; RICE, P. M. ; HUGHES, B. ;  
 SAMANT, M. ; YANG, S.-H.: . In: *Nature Mater.* 3 (2004), S. 862
- [26] IKEDA, S. ; HAYAKAWA, J. ; LEE, Y. M. ; TANIKAWA, T. ; MATSUKARA, F. ; OHNO,  
 H.: . In: *J. Appl. Phys.* 99 (2006), S. 08A907
- [27] LU, Y. ; TRAN, M. ; JAFFRÉS, H. ; SENEOR, P. ; DERANLOT, C. ; PETROFF, F. ;  
 GEORGE, J.-M. ; LÉPINE, B. ; ABABOU, S. ; JÉZÉQUEL, G.: . In: *Phys. Rev. Lett.*  
 102 (2009), S. 176801
- [28] PARKIN, S. S. P. ; ROCHE, K. P. ; SAMANT, M. G. ; RICE, P. M. ; BEYERS, R. B.  
 ; SCHEUERLEIN, R. E. ; O’SULLIVAN, E. J. ; BROWN, S. L. ; BUCCHIGANO, J. ;  
 ABRAHAM, D. W. ; LU, Y. ; ROOKS, M. ; TROUILLOUD, P. L. ; WANNER, R. A. ;  
 GALLAGHER, W. J.: . In: *J. Appl. Phys* 85 (1999), S. 5828
- [29] SLONCZEWSKI, J. C.: . In: *J. Magn. Magn. Mater.* 195 (1999), S. L261

- [30] SLONCZEWSKI, J. C.: . In: *J. Magn. Magn. Mater.* 247 (2002), S. 324
- [31] MILTAT, J. ; ALBUQUERQUE, G. ; THIAVILLE, A.: An Introduction to Micromagnetics in the Dynamic Regime. In: *Spin Dynamics in Confined Magnetic Structures I*. Berlin : Springer, 2002, S. 1
- [32] LANDAU, L. ; LIFSHITZ, E.: . In: *Phys. Z. Sowiet. Un.* 8 (1935), S. 153
- [33] GILBERT, T.: . In: *Phys. Rev.* 100 (1955), S. 1243
- [34] GILBERT, T.: . In: *IEEE Trans. Magn.* 40 (2004), S. 3443
- [35] HICKEY, M. C. ; MOODERA, J. S.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009), S. 137601
- [36] HANKIEWICZ, E. M. ; VIGNALE, G. ; TSERKOVNYAK, Y.: . In: *Phys. Rev. B* 75 (2007), S. 174434
- [37] MIZUKAMI, S. ; ANDO, Y. ; MIYAZAKI, T.: . In: *Phys. Rev. B* 66 (2002), S. 104413
- [38] INGVARSSON, S. ; RITCHIE, L. ; LIU, X. Y. ; XIAO, G. ; SLONCZEWSKI, J. C. ; TROUILLOUD, P. L. ; KOCH, R. H.: . In: *Phys. Rev. B* 66 (2002), S. 214416
- [39] HEINRICH, B. ; URBAN, R. ; WOLTERS DORF, G.: . In: *IEEE Trans. Magn.* 38 (2002), S. 2496
- [40] KUNEŠ, J. ; KAMBERSKÝ, V.: . In: *Phys. Rev. B* 65 (2002), S. 212411
- [41] DOBIN, A. Y. ; VICTORA, R. H.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 90 (2003), S. 167203
- [42] SINOVA, J. ; JUNGWIRTH, T. ; LIU, X. ; SASAKI, Y. ; FURDYNA, J. K. ; ATKINSON, W. A. ; MACDONALD, A. H.: . In: *Phys. Rev. B* 69 (2004), S. 085209
- [43] TSERKOVNYAK, Y. ; FIETE, G. A. ; HALPERIN, B. I.: . In: *Appl. Phys. Lett.* 84 (2004), S. 5234
- [44] KOOPMANS, B. ; RUIGROK, J. J. M. ; DALLA LONGA, F. ; DE JONGE, W. J. M.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 95 (2005), S. 267207
- [45] STEIAUF, D. ; FÄHNLE, M.: . In: *Phys. Rev. B* 72 (2005), S. 064450
- [46] STILES, M. D.: . In: *Phys. Rev. B* 66 (2002), S. 014407
- [47] SUN, J. Z.: . In: *Phys. Rev. B* 62 (2000), S. 570
- [48] HEIDE, C. ; ZILBERMAN, P. E. ; ELLIOTT, R. J.: . In: *Phys. Rev. B* 63 (2001), S. 064424
- [49] HEIDE, C.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001), S. 197201
- [50] MILTAT, J. ; ALBUQUERQUE, G. ; THIAVILLE, A. ; VOUILLE, C.: . In: *J. Appl. Phys.* 89 (2001), S. 6982

- [51] ZHANG, S. ; LEVY, P. M.: . In: *Phys. Rev. B* 65 (2002), S. 052409
- [52] TSERKOVNYAK, Y. ; BRATAAS, A. ; BAUER, G. E. W.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 88 (2002), S. 117601
- [53] ZHANG, S. ; LEVY, P. M. ; FERT, A.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 88 (2002), S. 236601
- [54] WEGROWE, J.-E.: . In: *Phys. Rev. B* 62 (2000), S. 1067
- [55] BRATAAS, A. ; NAZAROV, Y. V. ; BAUER, G. E. W.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000), S. 2481
- [56] WAIN TAL, X. ; MYERS, E. B. ; BROUWER, P. W. ; RALPH, D. C.: . In: *Phys. Rev. B* 6 (2000), S. 12317
- [57] HERNANDO, D. H. ; NAZAROV, Y. V. ; BRATAAS, A. ; BAUER, G. E. W.: . In: *Phys. Rev. B* 62 (2000), S. 5700
- [58] STILES, M. D. ; ZANGWILL, A.: . In: *J. Appl. Phys.* 91 (2002), S. 6812
- [59] GASSER, W. ; HEINER, E. ; ELK, K.: *Greensche Funktionen in der Festkörper- und Vielteilchenphysik*. Berlin : Wiley-VCH, 2005
- [60] HAUG, H. ; JAUHO, A.-P.: *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*. 2nd. Berlin : Springer, 2007
- [61] IMRY, Y.: *Introduction to mesoscopic physics*. Oxford : Oxford University Press, 2002
- [62] DATTA, S.: *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge : Cambridge University Press, 1995
- [63] XIA, K. ; KELLY, P. J. ; BAUER, G. E. W. ; BRATAAS, A. ; TUREK, I.: . In: *Phys. Rev. B* 65 (2002), S. 220401
- [64] HANEY, P. M. ; WALDRON, D. ; DUINE, R. A. ; NÚÑEZ, A. S. ; GUO, H. ; MACDONALD, A. H.: . In: *Phys. Rev. B* 76 (2007), S. 024404
- [65] EDWARDS, D. M. ; FEDERICI, F. ; MATHON, J. ; UMERSKI, A.: . In: *Phys. Rev. B* 71 (2005), S. 054407
- [66] EDWARDS, D. M. ; WESSELY, O.: . In: *J. Phys.: Condens. Matter* 21 (2009), S. 146002
- [67] WESSELY, O. ; EDWARDS, D. M. ; MATHON, J.: . In: *Phys. Rev. B* 77 (2008), S. 174425
- [68] MARTIN, P. C. ; SCHWINGER, J.: . In: *Phys. Rev.* 115 (1959), S. 1342
- [69] SCHWINGER, J.: . In: *J. Math. Phys.* 2 (1961), S. 407

- [70] KADANOFF, L. P. ; BAYM, G.: *Quantum Statistical Mechanics*. 1st. New York : W. A. Benjamin, 1962
- [71] NOLTING, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 7: Viel-Teilchen-Theorie*. 5. Auflage. Berlin : Springer, 2002
- [72] MAHAN, G. D.: *Many-Particle Physics*. 2nd. New York : Plenum Press, 1990
- [73] ZAGOSKIN, A. M.: *Quantum Theory of Many-Body Systems*. 1st. New York : Springer, 1998
- [74] PRINZ, G. A.: . In: *Physics Today* 48 (1995), S. 58
- [75] SINJUKOW, P. ; NOLTING, W.: . In: *Phys. Rev. B* 69 (2004), S. 214432
- [76] STIER, M. ; NOLTING, W.: . In: *Phys. Rev. B* 75 (2007), S. 144409
- [77] KELDYSH, L. V.: . In: *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 47 (1964), S. 1515. – Sov. Phys. - JETP 20, 1018 (1965)
- [78] MILLS, R.: *Propagators for Many-Particle Systems*. New York : Gordon and Breach, 1969
- [79] NOLTING, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 6: Statistische Physik*. 4. Auflage. Berlin : Springer, 2002
- [80] MATSUBARA, T.: . In: *Prog. Theoret. Phys.* 14 (1955), S. 351
- [81] RAMMER, J. ; SMITH, H.: . In: *Rev. Mod. Phys.* 58 (1986), S. 323
- [82] NOLTING, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 5/1: Quantenmechanik - Grundlagen*. 5. Auflage. Berlin : Springer, 2002
- [83] GELL-MANN, M. ; LOW, F.: . In: *Phys. Rev.* 84 (1951), S. 350
- [84] LANGRETH, D. C. ; DEVREESE, J. T. (Hrsg.) ; DOREN, E. van (Hrsg.): *Linear and Nonlinear Electron Transport in Solids*. New York : Plenum, 1976 (NATO Advanced Study Institute Series B). – 3 S.
- [85] SANDSCHNEIDER, N.: *Spinpolarisierte Tunnelströme durch magnetische Vielfachschichten*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diplomarbeit, 2007
- [86] SANDSCHNEIDER, N. ; NOLTING, W.: . In: *Phys. Rev. B* 76 (2007), S. 115315
- [87] LIFSHITZ, E. M. ; PITAEVSKII, L. P.: *Physical Kinetics*. Oxford : Butterworth-Heinemann, 1995 (Landau, Lev D.: Course of theoretical physics)
- [88] NG, T. K.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993), S. 3635
- [89] SERGUEEV, N. ; SUN, Q.-F. ; GUO, H. ; WANG, B. G. ; WANG, J.: . In: *Phys. Rev. B* 65 (2002), S. 165303

- [90] MAJUNDAR, K. ; SCHILLER, A. ; HERSHFIEL, S.: . In: *Phys. Rev. B* 57 (1998), S. 2991
- [91] FAZIO, R. ; RAIMONDI, R.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998), S. 2913
- [92] DREIZLER, R. M. ; GROSS, E. K. U.: *Density Functional Theory*. Berlin : Springer, 1990
- [93] HOHENBERG, P. ; KOHN, W.: . In: *Phys. Rev. B* 136 (1964), S. 864
- [94] PARR, R. G. ; YANG, W.: *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford : Oxford University Press, 1994
- [95] BARDEEN, J. ; COOPER, L. N. ; SCHRIEFFER, J. R.: . In: *Phys. Rev.* 108 (1957), S. 1175
- [96] MÜLLER, W. ; NOLTING, W.: . In: *Phys. Rev. B* 69 (2004), S. 155425
- [97] HELD, K. ; NEKRASOV, I. A. ; KELLER, G. ; EYERT, V. ; BLÜMER, N. ; MCMAHAN, A. K. ; SCALETTAR, A. T. ; PRUSCHKE, T. ; ANISIMOV, V. I. ; VOLLHARDT, D.: . In: *phys. stat. sol. (b)* 243 (2006), S. 2599
- [98] HUBBARD, J.: . In: *Proc. R. Soc. London A* 276 (1963), S. 238
- [99] GUTZWILLER, M. C.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 10 (1963), S. 159
- [100] KANAMORI, J.: . In: *Prog. Theor. Phys.* 30 (1963), S. 275
- [101] NOLTING, W.: *Quantentheorie des Magnetismus, Teil 2*. Stuttgart : Teubner, 1986
- [102] CZYCHOLL, G.: *Theoretische Festkörperphysik. 3*. Berlin : Springer, 2008
- [103] LIEB, E. ; WU, F.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 20 (1968), S. 1445
- [104] HARRIS, A. B. ; LANGE, R. V.: . In: *Phys. Rev.* 157 (1967), S. 295
- [105] NOLTING, W. ; BORGIEL, W.: . In: *Phys. Rev. B* 39 (1989), S. 6962
- [106] METZNER, W. ; VOLLHARDT, D.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 62 (1989), S. 324
- [107] GEORGES, A. ; KOTLIAR, G. ; KRAUTH, W. ; ROZENBERG, M. J.: . In: *Rev. Mod. Phys.* 68 (1996), S. 13
- [108] GRÜNBERG, P. ; BÜRGLER, D. E. ; DASSOW, H. ; RATA, A. D. ; SCHNEIDER, C. M.: . In: *Acta Mat.* 55 (2007), S. 1171
- [109] CAROLI, C. ; COMBESCOT, R. ; NOZIERES, P. ; SAINT-JAMES, D.: . In: *J. Phys. C* 4 (1971), S. 916
- [110] CAROLI, C. ; COMBESCOT, R. ; LEDERER, D. ; NOZIERES, P. ; SAINT-JAMES, D.: . In: *J. Phys. C* 4 (1971), S. 2598



- [111] CAROLI, C. ; COMBESCOT, R. ; NOZIERES, P. ; SAINT-JAMES, D.: . In: *J. Phys. C* 5 (1972), S. 21
- [112] MEIR, Y. ; WINGREEN, N. S.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 68 (1992), S. 2512
- [113] JAUHO, A.-P. ; WINGREEN, N. S. ; MEIR, Y.: . In: *Phys. Rev. B* 50 (1994), S. 5528
- [114] BLOCH, F.: . In: *Z. Physik* 52 (1928), S. 555
- [115] JELITTO, R. J.: . In: *J. Phys. Chem. Solids* 30 (1969), S. 609
- [116] SOMMERFELD, A.: . In: *Naturwissenschaften* 16 (1928), S. 374
- [117] RAZAVY, M.: *Quantum Theory of Tunneling*. Singapur : World Scientific, 2003
- [118] HERRMANN, T.: *Ferromagnetismus und temperaturabhängige elektronische Struktur in metallischen Filmen*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diss., 1999
- [119] GEIPEL, G. ; NOLTING, W.: . In: *Phys. Rev. B* 38 (1988), S. 2608
- [120] HERRMANN, T.: *Korrelationseffekte in der elektronischen Struktur eines Modell-Bandmagneten*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diplomarbeit, 1996
- [121] BUSSMANN, K. ; PRINZ, G. A. ; CHENG, S.-F. ; WANG, D.: . In: *Appl. Phys. Lett.* 75 (1999), S. 2476
- [122] KATINE, J. A. ; ALBERT, F. J. ; BUHRMAN, R. A.: . In: *Appl. Phys. Lett.* 76 (2000), S. 354
- [123] SANDSCHNEIDER, N. ; NOLTING, W.: . In: *Phys. Rev. B* 79 (2009), S. 184423
- [124] HUAI, Y. ; ALBERT, F. ; NGUYEN, P. ; PAKALA, M. ; VALET, T.: . In: *Appl. Phys. Lett.* 84 (2004), S. 3118
- [125] SCHRAG, B. D. ; ANGUELOUCH, A. ; INGVARSSON, S. ; XIAO, G. ; LU, Y. ; TROUILLOU, P. L. ; GUPTA, A. ; WANNER, R. A. ; GALLAGHER, W. J. ; RICE, P. M. ; PARKIN, S. S. P.: . In: *Appl. Phys. Lett.* 77 (2000), S. 2373
- [126] MOON, K.-S. ; FONTANA, R. E. Jr. ; PARKIN, S. S. P.: . In: *Appl. Phys. Lett.* 74 (1999), S. 3690
- [127] SAFFARZADEH, A. ; GHORBANI ASL, M.: . In: *Eur. Phys. J. B* 67 (2009), S. 239
- [128] SUKEGAWA, H. ; WANG, W. ; SHAN, R. ; NAKATANI, T. ; INOMATA, K. ; HONO, K.: . In: *Phys. Rev. B* 79 (2009), S. 184418
- [129] MILLER, C. W. ; LI, Z.-P. ; SCHULLER, I. K. ; DAVE, R. W. ; SLAUGHTER, J. M. ; ÅKERMAN, J.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007), S. 047206

- [130] PAPACONSTANTOPOULOS, D. A.: *Handbook of the Band Structure of Elemental Solids*. New York : Plenum Press, 1986
- [131] BINDER, Harry H.: *Lexikon der chemischen Elemente*. Stuttgart : S. Hirzel, 1999
- [132] PARK, J.-H. ; VESCOVO, E. ; KIM, H.-J. ; KWON, C. ; RAMESH, R. ; VENKATESAN, T.: . In: *Nature* 392 (1998), S. 794
- [133] XIE, W.-H. ; XU, Y.-Q. ; LIU, B.-G.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003), S. 037204
- [134] COEY, J. M. D. ; VENKATESAN, M.: . In: *J. Appl. Phys.* 91 (2002), S. 8345
- [135] SAKURABA, Y. ; HATTORI, M. ; OOGANE, M. ; ANDO, Y. ; KATO, H. ; SAKUMA, A. ; MIYAZAKI, T. ; KUBOTA, H.: . In: *Appl. Phys. Lett.* 88 (2006), S. 192508
- [136] YUNOKI, S. ; DAGOTTO, E. ; COSTAMAGNA, S. ; RIERA, J. A.: . In: *Phys. Rev. B* 78 (2008), S. 024405
- [137] WEGNER, T. ; POTTHOFF, M. ; NOLTING, W.: . In: *Phys. Rev. B* 57 (1998), S. 6211
- [138] MEYER, D. ; NOLTING, W.: . In: *Eur. Phys. J. B* 18 (2000), S. 385
- [139] POTTHOFF, M. ; WEGNER, T. ; NOLTING, W.: . In: *Phys. Rev. B* 55 (1997), S. 16132
- [140] POTTHOFF, M. ; WEGNER, T. ; NOLTING, W.: . In: *Phys. Rev. B* 55 (1997), S. 16132
- [141] WEGNER, T. ; POTTHOFF, M. ; NOLTING, W.: . In: *Phys. Rev. B* 57 (1998), S. 6211
- [142] FREERICKS, J. K. ; TURKOWSKI, V. M. ; ZLATIĆ, V.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 97 (2006), S. 266408
- [143] JOURA, A. V. ; FREERICKS, J. K. ; PRUSCHKE, T.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 101 (2008), S. 196401
- [144] OKAMOTO, S.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 101 (2008), S. 116807
- [145] HEARY, R. J. ; HAN, J. E.: *Perturbation study of nonequilibrium quasi-particle spectra in an infinite-dimensional Hubbard lattice*. cond-mat/arXiv:0904.3521v1, 2009
- [146] FREERICKS, J. K.: *Transport in multilayered nanostructures*. London : Imperial College Press, 2006
- [147] BRANDBYGE, M. ; MOZOS, J.-L. ; ORDEJÓN, P. ; TAYLOR, J. ; STOKBRO, K.: . In: *Phys. Rev. B* 65 (2002), S. 165401

- [148] CHANTIS, A. N. ; SANDU, T. ; XU, J. L.: . In: *PMC Physics B* 1 (2008), S. 13
- [149] WALDRON, D. ; LIU, L. ; GUO, H.: . In: *Nanotechnology* 18 (2007), S. 424026
- [150] WINGREEN, N. S. ; JAUHO, A.-P. ; MEIR, Y.: . In: *Phys. Rev. B* 48 (1993), S. 48
- [151] WEINBERGER, P. ; VERNES, A. ; GYÖRFFY, B. L. ; SZUNYOGH, L.: . In: *Phys. Rev. B* 70 (2004), S. 094401
- [152] JIN, D. ; REN, Y. ; LI, Z.-Z. ; XIAO, M.-W. ; JIN, G. ; HU, A.: . In: *J. Appl. Phys.* 99 (2006), S. 08T304
- [153] XU, Y. ; WANG, S. ; XIA, K.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008), S. 226602
- [154] DE JONG, M. J. M. ; BEENAKKER, C. W. J.: . In: *Phys. Rev. Lett.* 74 (1995), S. 1657
- [155] SHI, Y.-M. ; ZHOU, S.-P. ; CAO, X.-F. ; HUANG, H. ; CHEN, H.: . In: *Europhys. Lett.* 73 (2006), S. 941
- [156] ZHENG, Z. Y. ; LI, B. ; CLARO, F.: . In: *Phys. Rev. B* 68 (2003), S. 115319
- [157] ALPERIN, H. A. ; STEINSVOLL, O. ; NATHANS, R. ; SHIRANE, G.: . In: *Phys. Rev.* 154 (1967), S. 508
- [158] CHIONCEL, L. ; KATSNELSON, M. I. ; DE GROOT, R. A. ; LICHTENSTEIN, A. I.: . In: *Phys. Rev. B* 68 (2003), S. 144425



# Abbildungsverzeichnis

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 2.1 | Schematische Darstellung der Keldysh-Kontur $C$ . . . . .  | 12 |
| 2.2 | Deformation der Kontur zum Beweis der ersten analytischen Fortsetzungsregel . . . . .  | 16 |
| 3.1 | Schematische Darstellung eines Tunnelkontakts ohne (links) und mit (rechts) angelegter Spannung $V$ . Zwei Ferromagnete $L$ und $R$ sind durch einen Isolator $I$ voneinander getrennt. An den rechten Ferromagneten schließt sich ein paramagnetisches Metall $P$ an. Durch die Spannung werden die Bandschwerpunkte des rechten Ferromagneten und des Paramagneten um $V$ , der des Isolators um $\frac{V}{2}$ verschoben. Die dicken, schwarzen Pfeile symbolisieren die Magnetisierung, die im linken Ferromagnet immer nach oben zeigt, und im rechten variabel ist. . . . .  | 27 |
| 3.2 | Schematische Darstellung einer eindimensionalen Tunnelbarriere. Rechts von der Barriere liegt ein zusätzliches Potential $V = -\Delta$ an. . . . .   | 45 |
| 5.1 | Links: Zustandsdichten von zwei miteinander hybridisierenden Bänder für verschiedene Hybridisierungsstärken $\epsilon$ . Die Zustandsdichte des unteren Bandes ist durchgezogen, die des oberen Bandes gestrichen dargestellt. Parameter: $W = 2$ eV, $T_{0,2} = 1$ eV, $\gamma = 1$ . Rechts: Zustandsdichten der beiden Bänder für verschiedene Bandschwerpunkte $T_{0,2}$ des oberen Bands. Die Zustandsdichte des unteren Bandes ist gestrichen, die des oberen Bandes durchgezogen dargestellt. Zusätzlich sind die Zustandsdichten der beiden Bänder mit abgeschalteter Hybridisierung gepunktet eingezeichnet. Parameter: $W = 2$ eV, $\epsilon = 0.5$ eV, $\gamma = 1$ . . . . . | 76 |
| 5.2 | Links: Zustandsdichten zweier miteinander hybridisierenden Bänder für verschiedene Bandbreiten $W$ . Das obere Band ist gestrichen, das untere durchgezogen dargestellt. Parameter: $T_{0,2} = 2$ eV, $\epsilon = 0.5$ eV, $\gamma = 1$ . Rechts: Zustandsdichten der beiden Bänder für verschiedene spektrale Gewichte $\gamma$ des unteren Bandes. Der zweite Anteil des unteren Bandes liegt bei $T_{0,1} + V_1 = -100$ eV und ist nicht dargestellt. Das untere Band ist gestrichen, das obere durchgezogen gezeichnet. Parameter: $W = 2$ eV, $T_{0,2} = 2$ eV, $\epsilon = 0.5$ eV, $V_1 = -100$ eV. . . . .   | 77 |
| 5.3 | Quasiteilchenzustandsdichte in SDA- und Mean Field-Näherung. Parameter: $n = 0.7$ , $U = 4$ eV, $W = 2$ eV, $T_0 = 0$ eV, $T = 0$ K . . . . .  | 79 |

|      |  |    |
|------|--|----|
| 5.4  | Quasiteilchenzustandsdichten in SDA-Näherung. Spin Up-QDOS sind als durchgezogene, Spin Down-QDOS als gestrichene Linien eingezeichnet. In der linken Spalte sind sie für verschiedene Werte der Besetzungszahl $n$ , in der rechten für verschiedene Temperaturen $T$ gezeigt. Das chemische Potential wird durch die geraden Linien symbolisiert. Parameter: $U = 4$ eV, $W = 2$ eV, $T_0 = 0$ eV, $n = 0.7$ (rechts) und $T = 0$ K (links). . . . .   | 80 |
| 5.5  | Links: Magnetisierung als Funktion der Besetzungszahl $n$ . Rechts: Magnetisierung als Funktion der Coulomb-Wechselwirkungsstärke $U$ . Die durchgezogenen Linien wurden jeweils mit der SDA-, die gestrichenen mit der Mean Field-Näherung berechnet. Parameter: $U = 4$ eV (links), $n = 0.7$ (rechts), $W = 2$ eV, $T = 0$ K . . . . .  | 81 |
| 5.6  | Magnetisierung in Abhängigkeit der Bandbreite (links) bzw. der Temperatur (rechts) in SDA- und Mean Field-Näherung. Im rechten Bild ist die Mean Field-Kurve aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht vollständig dargestellt. Parameter: $n = 0.7$ , $U = 4$ eV, $W = 2$ eV (rechts), $T = 0$ K (links). . . . .   | 82 |
| 5.7  | Numerische Berechnung der Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der angelegten Spannung. Die Pfeile kennzeichnen, in welche Richtung die Spannung geändert wurde. Parameter aus Tab. 5.1. . . . .  | 85 |
| 5.8  | Quasiteilchenzustandsdichten zweier Ferromagnete ohne anliegende Spannung. Das linke Bild zeigt parallele, das rechte Bild antiparallele Orientierung der beiden Magnetisierungen (Punkte A bzw. E in Abb. 5.7). Die durchgezogene Linie ist die QDOS des rechten Ferromagneten in NSDA-, die gestrichene Linie die des linken Ferromagneten in Mean Field-Näherung. Das linke Spin Down-Band ist nicht gezeigt. Parameter aus Tab. 5.1. . . . .   | 87 |
| 5.9  | Von Huai <i>et al.</i> [124] experimentell gemessene Widerstandskurven einer magnetischen Tunnelstruktur. Links (a) in Abhängigkeit des äußeren Magnetfelds $H$ , rechts (b) in Abhängigkeit des anliegenden Stroms $I$ . . . . .  | 89 |
| 5.10 | Quasiteilchenzustandsdichten der einzelnen Regionen ohne anliegende Spannung mit paralleler (oben) bzw. antiparalleler (unten) Ausrichtung der beiden Ferromagnete. Die beiden äußeren Schichten wurden im Gleichgewicht, die inneren im Nichtgleichgewicht berechnet. Der umpunktete Bereich im Isolator ist im Inset zusätzlich vergrößert dargestellt. Es wurden die Standardparameter aus Tab. 5.1 verwendet. Daher ist das Spin Down-Band des linken Ferromagneten nicht sichtbar, da es bei $E \approx U_L n = 14$ eV liegt. Die dünnen schwarzen Linien kennzeichnen die beiden, in diesem Fall identischen, chemischen Potentiale $\mu_L$ und $\mu_P$ . Die Pfeile symbolisieren die jeweilige Spinrichtung. . . . . | 91 |
| 5.11 | Energieabhängige Beiträge zum Spin Up-Gesamtstrom. Neben den vier Teilströmen $j_{IR}, j_{RI}, j_{PR}$ und $j_{RP}$ sind im Inset zusätzlich die Ströme $j_{RP} + j_{PR} = j_{RI} + j_{IR}$ und die zeitliche Ableitung der Teilchenzahl $\langle \dot{N}_R^{\sigma} \rangle$ gezeigt. Es wurden die Parameter aus Tab. 5.1 und eine Spannung von $V = 0.2$ benutzt. . . . .   | 92 |

- 5.12 Strom und Magnetisierung als Funktion der Spannung für zwei verschiedene Hybridisierungsstärken  $\epsilon_{MI}$ . Der Strom ist in willkürlichen Einheiten angegeben. In den Insets ist er über einen größeren Spannungsbereich gezeigt. Im linken Bild ist  $\epsilon_{MI} = 0.2$  eV, im rechten  $\epsilon_{MI} = 0.5$  eV. Die restlichen Parameter wurden aus Tab. 5.1 übernommen. . . . . 94
- 5.13 Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Besetzungszahl  $n$  ohne anliegende Spannung. Die durchgezogene Linie gilt für parallele, die gestrichene Linie für antiparallele Ausrichtung der Magnetisierungen. Die Besetzungszahl  $n_R$  des rechten Ferromagneten ist als rote Kurve dargestellt. Zusätzlich sind noch die SDA-Magnetisierung und die Magnetisierung des linken Ferromagneten eingezeichnet. Rechts: Quasiteilchenzustandsdichten der beiden Ferromagnete für  $n = 0.5$ . Das Spin Down-Band des linken Ferromagneten ist nicht gezeigt. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 97
- 5.14 Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve des rechten Ferromagneten für verschiedene Bandbesetzungen  $n$ . Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von der Bandbesetzung. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 99
- 5.15 Tunnelstrom als Funktion der anliegenden Spannung für mehrere Besetzungszahlen  $n$  und parallele (links) bzw. antiparallele (rechts) Orientierung der beiden Magnetisierungen. Der Strom ist in willkürlichen Einheiten angegeben. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 100
- 5.16 Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten in Abhängigkeit der linken Coulomb-Wechselwirkungsstärke  $U_L$  für beide Orientierungen ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung dargestellt. Außerdem ist die Magnetisierung des linken Ferromagneten eingezeichnet. Rechts: Besetzungszahl des rechten Ferromagneten für parallele Orientierung in Abhängigkeit der linken Coulomb-Wechselwirkungsstärke  $U_L$  ohne angelegte Spannung. Inset: Linkes chemisches Potential  $\mu_L$  als Funktion von  $U_L$ . Parameter aus Tab. 5.1. 101
- 5.17 Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve des rechten Ferromagneten für verschiedene Coulomb-Abstoßungen  $U_L$  im linken Ferromagneten. Rechts: Abhängigkeit des Switchingpunkts von  $U_L$ . Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. PM bezeichnet die paramagnetische Phase. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 103
- 5.18 Magnetisierung des rechten Ferromagneten für beide Orientierungen als Funktion der rechten Wechselwirkungsstärke  $U_R$  ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung dargestellt. Die gepunktete Linie ist die entsprechende Gleichgewichtsmagnetisierung der SDA. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 105

|      |  |     |
|------|--|-----|
| 5.19 | Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurven des rechten Ferromagneten für verschiedene Coulomb-Wechselwirkungsstärken $U_R$ . Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von $U_R$ . Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . .   | 106 |
| 5.20 | Quasiteilchenzustandsdichten des rechten Ferromagneten für verschiedene Hybridisierungsstärken $\epsilon_{MI}$ . Es sind nur die unteren Hubbard-Bänder dargestellt. Im linken Bild sind die Magnetisierungen parallel, im rechten antiparallel orientiert. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . .  | 107 |
| 5.21 | Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Hybridisierungsstärke $\epsilon_{MI}$ zwischen dem Isolator und den beiden Ferromagneten ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung dargestellt. Parameter aus Tab. 5.1. . . . .  | 108 |
| 5.22 | Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurven des rechten Ferromagneten für verschiedene Hybridisierungsstärken $\epsilon_{MI}$ . Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von der Hybridisierung. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . .   | 109 |
| 5.23 | Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Hybridisierungsstärke $\epsilon_{RP}$ zwischen rechtem Ferromagnet und Paramagnet ohne anliegende Spannung. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . .  | 110 |
| 5.24 | Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurven des rechten Ferromagneten für verschiedene Hybridisierungsstärken $\epsilon_{RP}$ zwischen rechtem Ferromagnet und Paramagnet. Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von $\epsilon_{RP}$ . Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1. . . . .  | 112 |
| 5.25 | Quasiteilchenzustandsdichte des rechten Ferromagneten und des Paramagneten mit $\epsilon_{RP} = 0.01$ eV und paralleler Ausrichtung der beiden Magnetisierungen. Alle anderen Parameter stimmen mit denen aus Tab. 5.1 überein. . . . . .  | 113 |
| 5.26 | Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion des Isolatorbandschwerpunkts $T_{0,I}$ für parallele und antiparallele Orientierung ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung dargestellt. Rechts: Quasiteilchenzustandsdichten des rechten Ferromagneten in paralleler Orientierung für verschiedene Isolatorbandschwerpunkte. Der umrahmte Bereich ist im Inset vergrößert dargestellt. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . . | 114 |
| 5.27 | Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve des rechten Ferromagneten für verschiedene Werte des Isolatorbandschwerpunkts $T_{0,I}$ . Rechts: Abhängigkeit des Switchingpunkts vom Isolatorbandschwerpunkt. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . .   | 116 |



- 5.28 Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der linken Bandbreite  $W_L$ . Die durchgezogene Linie gilt für parallele, die gestrichene Linie für antiparallele Ausrichtung der Magnetisierungen. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung eingezeichnet. Außerdem ist die Magnetisierung des linken Ferromagneten gepunktet dargestellt. Rechts: Veränderung der rechten Besetzungszahl  $n_R$  in Abhängigkeit der linken Bandbreite. Im Inset ist das linke chemische Potential  $\mu_L$  gezeigt. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 117
- 5.29 Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve des rechten Ferromagneten für verschiedene Bandbreiten  $W_L$  des linken Ferromagneten. Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von  $W_L$ . Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 118
- 5.30 Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Isolatorbandbreite  $W_I$  für parallele und antiparallele Orientierung der Magnetisierungen ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung dargestellt. Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von der Isolatorbandbreite. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 119
- 5.31 Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der rechten Bandbreite  $W_R$  für parallele und antiparallele Orientierungen ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung und die SDA-Magnetisierung eingezeichnet. Rechts: Imaginärteil der wellenzahlgemittelten rechten kleineren Greenfunktion  $\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_R} G_{\mathbf{k}_R\sigma}^<(E)$  für verschiedene Bandbreiten und parallele Orientierung. Der eingerahmte Bereich ist zusätzlich im Inset vergrößert dargestellt. Außerdem ist die paramagnetische Zustandsdichte (grüne Linie) eingezeichnet. 120
- 5.32 Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve des rechten Ferromagneten für verschiedene Bandbreiten  $W_R$ . Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von der rechten Bandbreite. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 122
- 5.33 Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Bandbreite  $W_P$  des Paramagnets für parallele und antiparallele Orientierung der Magnetisierungen ohne anliegende Spannung. Parameter aus Tab. 5.1. . . 123
- 5.34 Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve des rechten Ferromagneten für verschiedene Bandbreiten  $W_P$  des Paramagneten. Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von  $W_P$ . Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 124

- 5.35 Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Temperatur ohne anliegende Spannung. Die durchgezogene Linie entspricht paralleler, die gestrichene Linie antiparalleler Orientierung der Magnetisierungen. Zur besseren Vergleichbarkeit ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung und die SDA-Magnetisierung dargestellt. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 125
- 5.36 Links: Spannungsabhängige Magnetisierungskurve für verschiedene Temperaturen  $T$ . Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung von der Temperatur. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1. . . . 126
- 5.37 Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion seines Bandschwerpunkts  $T_{0,R}$  in paralleler und antiparalleler Orientierung ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist der Betrag der antiparallelen Magnetisierung dargestellt. Die Gesamtbesetzungszahl  $n_R$  des rechten Ferromagneten ist zusätzlich als gepunktete Linie eingezeichnet. Rechts: Abhängigkeit der kritischen Spannung vom rechten Bandschwerpunkt. Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 128
- 5.38 Links: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Besetzungszahl in paralleler (durchgezogene Linien) und antiparalleler (gestrichene Linien) Orientierung ohne anliegende Spannung. Für die schwarzen Kurven wurde der rechte Bandschwerpunkt über Gl. (5.12), für die roten Kurven über Gl. (5.13) selbstkonsistent festgelegt. Die grüne Kurve entspricht der Magnetisierung in SDA-Näherung, d.h. im Gleichgewicht. Die blauen Kurven sind zum Vergleich aus Abb. 5.13 übernommen. Rechts: Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der linken Bandbreite. Die Farben entsprechen dem linken Bild. Parameter aus Tab. 5.1. . . . 130
- 5.39 Abhängigkeit der kritischen Spannung von der Besetzungszahl (linkes Bild) bzw. der linken Bandbreite (rechtes Bild). Positive Spannungen gelten ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen ausgehend von paralleler Orientierung der Magnetisierungen. Für die schwarze Kurven wurde der rechte Bandschwerpunkt über Gl. (5.12), für die roten Kurve über Gl. (5.13) selbstkonsistent festgelegt. PM steht für Paramagnetismus. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 131
- 5.40 Magnetisierung des rechten Ferromagneten in Mean Field-Näherung in Abhängigkeit der rechten Wechselwirkungsstärke  $U_R$  (linkes Bild) bzw. der Besetzungszahl  $n$  (rechtes Bild) für beide Orientierungen ohne anliegende Spannung. Zum besseren Vergleich ist im rechten Bild der Betrag der antiparallelen Magnetisierung und zusätzlich noch die Magnetisierung des linken Ferromagneten eingezeichnet. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 134
- 5.41 Abhängigkeit der kritischen Spannung von der rechten Wechselwirkungsstärke  $U_R$  (links) bzw. der Besetzungszahl  $n$  (rechts) mit Mean Field-Näherung für beide Ferromagnete. Positive Spannungen gelten jeweils ausgehend von antiparalleler, negative Spannungen von paralleler Orientierung. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . 135

|      |   |     |
|------|---|-----|
| 5.42 | Magnetisierung des rechten Ferromagneten für verschiedene Stärken der linken Coulomb-Abstoßung $U_L$ . Der linke Ferromagnet wird in SDA-, der rechte in NSDA-Näherung beschrieben. Parameter aus Tab. 5.1. . . . .   | 137 |
| 5.43 | Quasiteilchenzustandsdichten der beiden Ferromagnete im SDA-NSDA-System für antiparallele Orientierung und $V = 0$ . Es sind lediglich die unteren Hubbard-Bänder dargestellt. Parameter aus Tab. 5.1. . . . .  | 137 |
| 5.44 | Tunnelstrom in Abhängigkeit der Spannung für beide Spinrichtungen und $U_L = 10$ eV ausgehend von paralleler Orientierung der beiden Magnetisierungen. Der linke Ferromagnet wird in SDA-, der rechte in NSDA-Näherung behandelt. Die restlichen Parameter wurden aus Tab. 5.1 übernommen. . . . .  | 138 |
| 5.45 | Links: Mean Field-Magnetisierung des rechten Ferromagneten als Funktion der Hybridisierungsstärke $\epsilon_{MI}$ ohne anliegende Spannung. Die schwarzen Kurven wurden ohne, die roten Kurven mit Diagonalannahme berechnet. Durchgezogene Linien stehen für parallele, gestrichene Linien für antiparallele Ausrichtung der Magnetisierungen. Rechts: Spannungsabhängige Magnetisierungskurven des rechten Ferromagneten für zwei verschiedene Hybridisierungsstärken $\epsilon_{MI}$ . Die durchgezogenen Linien wurden in diesem Fall ohne, die gestrichenen mit der Diagonalannahme berechnet. Parameter aus Tab. 5.1. . . . . | 141 |



# Tabellenverzeichnis

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 2.1 | Analytische Forsetzungsregeln . . . . .   | 15 |
| 5.1 | Standardparameter. In allen weiteren Rechnungen werden, sofern nicht<br>anders angegeben, diese Parameterwerte verwendet. . . . . | 83 |



# Selbständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt habe. Die benutzten Hilfsmittel habe ich vollständig angegeben.

Berlin, 31. Juli 2009